

Zur Lösung des quantenmechanischen Drei-Körper-Problems

von

Hanns Ruder
aus Nürnberg

1967



Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41533917_0020

Zur Lösung des quantenmechanischen Drei-Körper-Problems

Der Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg

zur
Erlangung des Doktorgrades

vorgelegt von

Hanns Ruder
aus Nürnberg

Erlangen 1967



Als Dissertation genehmigt von der Naturwissenschaftlichen
Fakultät der Universität Erlangen-Nürnberg.

Tag der mündlichen Prüfung 24. Mai 1967

Präsident:	Prof. Dr. K. Brodersen
Erstberichterstatler:	Prof. Dr. H. Volz
Weitberichterstatler:	Prof. Dr. L. Waldmann

Inhaltsverzeichnis

A. EINLEITUNG

B. KOORDINATENWAHL

- I. Raumfestes Koordinatensystem
- II. Innere Koordinaten
- III. Körpergebundenes Koordinatensystem

C. SCHRÖDINGERGLEICHUNG

D. ZERLEGUNG DES DREHIMPULSOPERATORS AUF KÖRPERGEBUNDENE ACHSEN

E. INVARIANZEN DES HAMILTONOPERATORS

- I. Drehinvarianz
- II. Parität
- III. Teilchenvertauschung

F. LÖSUNGSTHEORIE FÜR DIE ÄUSSEREN KOORDINATEN

G. LÖSUNGSTHEORIE FÜR DIE INNEREN KOORDINATEN

- I. Spezielle Lösung im raumfesten Koordinatensystem
- II. Umrechnung der raumfesten Lösung
- III. Diskussion der umgerechneten Lösung
- IV. Einsetzen der Lösung
- V. Zusammenfassung

H. LÖSUNGSPRAXIS

- I. $\mathfrak{g}$ und r starr; $V = V(u)$
- II. $\mathfrak{g}$ starr; $V = V(ru)$
- III. $V = V(\mathfrak{g}ru)$

A. EINLEITUNG

Das 3-Körper-Problem nimmt in der klassischen Mechanik und in der Quantenmechanik eine Sonderstellung ein. Es ist das einfachste nicht mehr allgemein separierbare Mehrteilchenproblem. Dadurch besitzt es einerseits schon viele Eigenschaften von größeren Mehrteilchenproblemen, läßt sich aber andererseits noch mit vernünftigem Aufwand behandeln. Aus diesem Grund haben sich am 3-Körper-Problem wesentliche Methoden der Störungsrechnung entwickelt. Neben seiner theoretischen Bedeutung besitzt es äußerst wichtige Anwendungsmöglichkeiten. Sie stammen beim quantenmechanischen 3-Körper-Problem aus der Atom-, Molekül- und Kernphysik.

In der Atomphysik ist als erstes das Heliumatom zu nennen. Da bei seiner Behandlung die ältere Bohrsche Quantentheorie völlig versagt hat, wurde das Heliumatom ein wichtiger Prüfstein für die moderne Quantenmechanik. Das sehr schwach gebundene H^- -Ion ist ebenfalls ein interessantes System, weil es für die Physik der Sternatmosphären eine große Rolle spielt und weil für dieses System keine experimentellen Daten vorliegen.

Die wichtigste Anwendungsmöglichkeit aus der Molekülphysik ist das Wasserstoffmolekülion H_2^+ . Es ist das einfachste Molekül und bildet daher die Grundlage für die Behandlung aller komplizierteren 2-atomigen Moleküle. Eng verwandt mit dem H_2^+ -Ion sind die μ -mesonischen Ionen $pp\mu^-$ und $dd\mu^-$.

Eine Sonderstellung unter diesen Problemen nimmt das Positronium-Ion $e^+e^-e^-$ wegen seiner 3 gleichen Massen ein.

In der Kernphysik gibt es zwei Systeme, die aus 3 Nukleonen bestehen: der He^3 -Kern und das Triton H^3 . Sie bilden das ein-

fachste Paar von Spiegelkernen, und der Vergleich ihrer Bindungsenergien liefert eine Aussage über die Ladungssymmetrie der Kernkräfte. Außerdem stehen diese beiden Systeme im Mittelpunkt bei der Frage nach den Mehrkörperkräften in der Kernphysik.

In einer modifizierten Form, bei der 2 der 3 Teilchen zu einem "Rumpf" zusammengefaßt sind und das 3. Teilchen als "Außennukleon" betrachtet wird, kann das 3-Körper-Problem als Modell für u-g-Kerne verwendet werden.

Da für die Atom- und Molekülphysik der Spin vernachlässigbar ist und auch für die Systeme der Kernphysik zunächst die spinfreien Anteile der Lösungen benötigt werden, behandeln wir im folgenden das 3-Körper-Problem für Teilchen ohne Spin.

B. KOORDINATENWAHL

Die in der Natur vorkommenden Systeme aus 3 Teilchen unterscheiden sich durch die Masse der Teilchen und durch die Wechselwirkung zwischen ihnen. Für unsere Überlegungen nehmen wir zunächst an, daß die Wechselwirkung nur eine Funktion der 3 Abstände ist, also keine Spin-Bahn-Kopplung oder ähnliches vorkommt. Die Massen gehen als Faktoren in den Ausdruck für die kinetische Energie ein. Unser erstes Ziel ist es nun, Koordinaten zu suchen, die alle physikalischen Symmetrien und Besonderheiten der auftretenden 3-Teilchen-Systeme ausnutzen, ohne daß wir uns über das Potential und das Massenverhältnis äußern müssen. Von der Wahl dieser Koordinaten hängt es ab, wie kompliziert die Schrödingergleichung und die Lösungsfunktionen werden und wie weit man auftretende Ausdrücke anschaulich deuten kann. Da außerdem die meisten Arbeiten über das quantenmechanische 3-Körper-Problem im wesentlichen durch die verwendeten Koordinaten charakterisiert sind, geben wir an dieser Stelle gleich einen Überblick über einige frühere Versuche und diskutieren sie kurz.

I. Raumfestes Koordinatensystem:

Da sich eine Bewegung des Schwerpunkts immer abseparieren läßt und physikalisch uninteressant ist, soll der Schwerpunkt ruhen, und wir legen in ihn den Ursprung des raumfesten Koordinatensystems. Die Achsen werden mit X, Y, Z bezeichnet. In diesem System messen wir den Drehimpuls, auch dann, wenn er nicht auf raumfeste Achsen zerlegt wird.

II. Innere Koordinaten:

Zur Beschreibung der Lage von 3 Massenpunkten benötigt man 9 Koordinaten. Davon bestimmen 3 den Schwerpunkt und die restlichen 6 die Lage relativ zum Schwerpunkt. Da bei uns der Schwerpunkt ruht, genügen also 6 Koordinaten. Für diese 6 Koordinaten gibt es nun 2 grundsätzlich verschiedene Möglichkeiten:

- a) Man beschreibt jeden Massenpunkt vom raumfesten System aus, zum Beispiel mit kartesischen Koordinaten unter Mitverwendung des Schwerpunktsatzes.
- b) Man verwendet 3 Koordinaten, um die Gestalt des Dreiecks festzulegen, das von den 3 Massenpunkten gebildet wird, und die restlichen 3 für die Orientierung des Dreiecks im Raum.

Ein Spezialfall von Punkt a) wird in der Dissertation von L. WEIGERT [1] behandelt. Seine Koordinatenwahl liefert einen einfachen Ausdruck für die kinetische Energie, aber die potentielle Energie hängt im allgemeinen von allen 6 Koordinaten in komplizierter Weise ab. Daher kann man für ein beliebiges Potential nur wenig aussagen, und man muß außerdem bei einer Störungsrechnung über 6 Variable integrieren. Für unsere Zielsetzung ist zweifellos die Möglichkeit b) zu wählen, denn dort wird der physikalische Tatbestand, daß die potentielle Energie nur von der relativen Lage der 3 Massenpunkte abhängt, voll ausgenutzt. Die potentielle Energie ist dann nur eine Funktion der 3 Koordinaten, die die Gestalt des Dreiecks festlegen. Diese Koordinaten nennen wir innere Koordinaten. Für ihre Definition gibt es mehrere Möglichkeiten:

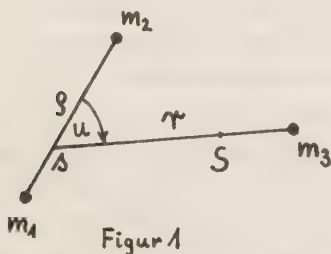
- a) 3 Längen im Dreieck
- b) 2 Längen und 1 Winkel
- c) 1 Länge und 2 Winkel

Hier eine Entscheidung zu treffen, ist nicht mehr so einfach wie oben, denn sie wird von dem letztlich zu behandelnden Problem beeinflusst. Es gibt sicher keine Koordinaten, die für alle denkbaren 3-Körper-Probleme optimal passen und auch bei numerischen Rechnungen zu den besten Resultaten führen. So haben alle 3 Möglichkeiten ihre Berechtigung und werden für die verschiedenen Fragestellungen angewandt.

Betrachten wir zunächst Fall a). Es ist naheliegend, für die 3 Längen die gegenseitigen Abstände der 3 Massenpunkte zu wählen, wie es zum Beispiel FLÜGGE und Mitarbeiter [2] tun. Dadurch wird der Ausdruck für die potentielle Energie am einfachsten, die

kinetische Energie dagegen wird relativ kompliziert. Außerdem muß man bei der Rechnung immer die Dreiecksungleichung als Nebenbedingung beachten. Da diese Koordinaten kein Teilchen auszeichnen, sind sie besonders der Behandlung von Systemen angepaßt, bei denen die 3 Teilchen entweder alle gleich oder alle verschieden sind. Trotzdem liefern bei Variationsansätzen gerade die 3 Abstände oder Linearkombinationen von ihnen als Koordinaten die besten numerischen Ergebnisse für den Grundzustand von Helium und von heliumähnlichen Ionen, wie es sich in den zum Teil sehr umfangreichen Rechnungen der letzten 40 Jahre gezeigt hat.

Für den Fall b) bieten sich mehrere Möglichkeiten an, so zum Beispiel 2 Seiten und der dazwischenliegende Winkel. Jedoch ist eine Möglichkeit, die von MANNEBACK und seinem Schüler VO-THE-HAO [3], sowie in den Diplomarbeiten von H. NÄPFEL und H. RUDER [4] verwendet wird, besonders ausgezeichnet. Sie wird in der folgenden Zeichnung erläutert:



s ist der Schwerpunkt von m_1 und m_2

S der Gesamtschwerpunkt

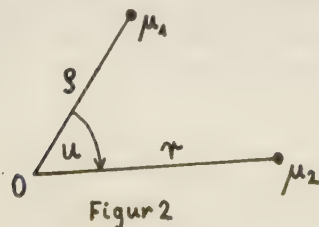
Variationsbereich:

$$0 \leq \varrho \leq \infty, 0 \leq r \leq \infty, 0 \leq u \leq \pi$$

Die Koordinaten ϱ , r und u sollen auch in dieser Arbeit benutzt werden. Sie haben zwei wesentliche Vorteile:

- 1) Der Ausdruck für die kinetische Energie des 3-Teilchen-Systems wird gleich dem für ein 2-Teilchen-System mit den Massen

$$\mu_1 = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad \text{und} \quad \mu_2 = \frac{(m_1 + m_2) m_3}{m_1 + m_2 + m_3} \quad \text{in der folgenden Anordnung:}$$



O ist der Ursprung des raumfesten Koordinatensystems

Die Umrechnung findet man in [4]

Dieses 2-Teilchen-System nennen wir das reduzierte System, μ_1 und μ_2 die reduzierten Massen. Wir können nun mit dem einfacheren reduzierten System rechnen, müssen aber immer beachten, daß alle physikalischen Überlegungen am 3-Teilchen-System durchzuführen und dann auf das 2-Teilchen-System zu übertragen sind. So gehen beispielsweise in die potentielle Energie nicht die geometrischen Abstände des reduzierten Systems ein, sondern die wirklichen Abstände

$$s, \sqrt{r^2 + \left(\frac{m_1}{m_1+m_2} s\right)^2 - 2r\left(\frac{m_1}{m_1+m_2} s\right) \cos u}, \sqrt{r^2 + \left(\frac{m_2}{m_1+m_2} s\right)^2 + 2r\left(\frac{m_2}{m_1+m_2} s\right) \cos u}$$

- 2) Wenn man die wichtigsten in der Natur vorkommenden Systeme, die wir in der Einleitung aufgezählt haben, betrachtet, so findet man, daß sie alle gerade 2 gleiche Teilchen enthalten. Da unsere Koordinaten ebenfalls 2 Teilchen auszeichnen, können wir diese Symmetrie sehr gut ausnutzen. Das zeigt sich unter anderem daran, daß bei der Vertauschung von Teilchen 1 und 2, falls $m_1=m_2$ ist, nur eine innere Koordinate geändert wird: der Winkel u geht in $\pi-u$ über.

Wie günstig sich die beiden Punkte für unsere Lösungstheorie auswirken, wird sich im Laufe der Rechnung zeigen.

Fall c) dürfte besonders für Probleme geeignet sein, bei denen der Endzustand aus 3 auseinanderfliegenden Teilchen besteht, weil dabei asymptotisch das von den 3 Teilchen gebildete Dreieck ähnlich bleibt und sich also nur eine Koordinate, nämlich die Länge, ändert. Das gilt aber nicht für die Streuung von einem Teilchen an einem Zentrum, das von den beiden anderen Teilchen gebildet wird und auch nach der Streuung bestehen bleibt. Zum Fall c) gehören auch die von ZICKENDRAHT [5,6] verwendeten Koordinaten. Sie lassen sich geometrisch nur schwer veranschaulichen und wir können sie daher nicht kurz an einer Zeichnung erläutern. Seine Gleichungen und Funktionen werden für verschiedene Massen und besonders für höhere Drehimpulse sehr kompliziert.

III. Körpergebundenes Koordinatensystem:

Hat man sich für die inneren Koordinaten entschieden, so muß man noch die Orientierung des Dreiecks im Raum angeben. Dazu definiert man ein rechtwinkliges Koordinatensystem $\{ \eta, \zeta \}$, dessen Lage relativ zu den 3 Massenpunkten eindeutig festgelegt ist. Wir nennen dieses Koordinatensystem deshalb körpergebunden. Sein Ursprung soll mit dem Ursprung S des raumfesten Systems zusammenfallen. Mit Hilfe von Eulerschen Winkeln α, β, γ können wir dann das körpergebundene Koordinatensystem bezüglich des raumfesten fixieren. Die Eulerschen Winkel bezeichnen wir, im Gegensatz zu g, r, u als äußere Koordinaten. Mit den 6 Koordinaten g, r, u und α, β, γ ist die Lage der 3 Massenpunkte im raumfesten System bestimmt.

Als erstes müssen wir nun die Vorschrift für das körpergebundene Koordinatensystem angeben. Auch hier gibt es verschiedene Möglichkeiten. Eine Richtung ist allerdings, unabhängig von der Wahl der inneren Koordinaten, immer ausgezeichnet, nämlich die Flächennormale auf die von den 3 Massenpunkten gebildete Ebene. In diese Richtung legen wir eine Koordinatenachse. Die beiden anderen Achsen liegen dann in der Ebene, und alle noch verbleibenden Möglichkeiten unterscheiden sich durch eine Drehung um die Flächennormale. Inwieweit man durch eine solche Verdrehung die Schrödingergleichung beeinflussen kann, wurde in [4] genau untersucht. Es hat sich dabei herausgestellt, daß die Verkopplung von inneren und äußeren Koordinaten am einfachsten wird, wenn man eine der Achsen parallel zur g - oder r -Richtung legt. Welche der beiden Richtungen man wählt, ist von untergeordneter Bedeutung. Das sieht man besonders gut am reduzierten System, wo g und r in der kinetischen Energie völlig gleichberechtigt vorkommen. Parallel zur g - bzw. r -Richtung bedeutet im reduzierten System, daß die Achse mit g bzw. r zusammenfällt, da hier der Ursprung des raumfesten und damit auch der des körpergebundenen Koordinatensystems im Punkt O liegen. Wir nehmen zunächst die g -Richtung, werden aber später auch die r -Richtung diskutie-

ren. Da beide Fälle Teilchen 1 und 2 auszeichnen, finden wir auch hier wieder die für die Anwendung wichtige Symmetrie zweier gleicher Teilchen berücksichtigt.

Durch die Flächennormale und die ϑ - bzw. r -Richtung haben wir 2 Achsen des körpergebundenen Koordinatensystems bestimmt. Die dritte Achse ergibt sich dann bei einem rechtshändigen Koordinatensystem zwangsläufig. Es gibt jetzt noch 3 verschiedene Möglichkeiten, die Achsen mit $\{\xi, \eta, \zeta\}$ zu bezeichnen. Da hierdurch festgelegt wird, wie die Eulerschen Winkel gezählt werden und welche Achse die körpergebundene Quantisierungsachse wird, beeinflußt auch diese Entscheidung die Schrödingergleichung wesentlich. Dieser Punkt wurde ebenfalls in [4] untersucht. Sowohl die Flächennormale als auch die ϑ - bzw. r -Richtung als Quantisierungsachse haben ihre Vorteile. In dieser Arbeit zeigt sich jedoch, daß die ϑ - bzw. r -Achsen-Quantisierung zu einer Schrödingergleichung führt, die besonders gut physikalisch zu interpretieren ist und sehr einfache Lösungsentwicklungen für die inneren Koordinaten erlaubt.

Wir erläutern nun die endgültig gewählten Koordinaten an einer Zeichnung und stellen alle Beziehungen zusammen, die wir später benötigen werden und die aus der Zeichnung ersichtlich sind.

Der Winkel u ist der Polarwinkel von μ_2 im körpergebundenen Koordinatensystem $\xi\eta\zeta$. Der dazugehörige Azimutwinkel ist immer Null, da μ_2 in der $\xi\zeta$ -Ebene liegt. Diese Feststellungen werden dann wichtig, wenn wir die Lösungsfunktionen und Operatoren der Schrödingergleichung interpretieren.

Verhalten bei Symmetrieoperationen:

1) Spiegelung am Ursprung

Wir nennen den Paritätsoperator P , seine Wirkung auf die Koordinaten ist:

$$\alpha \rightarrow \pi + \alpha, \beta \rightarrow \pi - \beta, \gamma \rightarrow \pi - \gamma; \quad u \rightarrow u, \vartheta \rightarrow \vartheta, \tau \rightarrow \tau$$

2) Vertauschung von Teilchen 1 und 2

Den Austauschoperator bezeichnen wir mit E_{12} ; wenn $m_1 = m_2$ ist, bewirkt er folgende Änderung in den Koordinaten:

$$\alpha \rightarrow \pi + \alpha, \beta \rightarrow \pi - \beta, \gamma \rightarrow 2\pi - \gamma; \quad u \rightarrow \pi - u, \vartheta \rightarrow \vartheta, \tau \rightarrow \tau$$

C. SCHRÖDINGERGLEICHUNG

Wir müssen nun die Schrödingergleichung für unser 3-Teilchen-System in den Koordinaten $\alpha, \beta, \gamma; \vartheta, \tau, u$ aufstellen. ~~Zu diesem~~ Zu diesem Zweck berechnen wir die klassische kinetische Energie als Funktion dieser Koordinaten und der dazu kanonisch konjugierten Impulse und übersetzen sie mit der Schrödingerschen Quantisierungsvorschrift [7]. Es ergibt sich nach längerer Rechnung (siehe [4]):

$$H\psi = (H_i + H_\alpha + H_\kappa)\psi = E\psi$$

$$H_i = -\frac{\hbar^2}{2\mu_1} \left(\frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} + \frac{2}{\vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) - \frac{\hbar^2}{2\mu_2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + \frac{2}{\tau} \frac{\partial}{\partial \tau} \right) - \\ - \left(\frac{\hbar^2}{2\mu_1 \vartheta^3} + \frac{\hbar^2}{2\mu_2 \tau^2} \right) \left(\frac{\partial^2}{\partial u^2} + \cot u \frac{\partial}{\partial u} + \frac{1}{\sin^2 u} \frac{\partial^2}{\partial \gamma^2} \right) + V(\vartheta \tau u)$$

$$H_\alpha = -\frac{\hbar^2}{2\mu_1 \vartheta^2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \beta^2} + \cot \beta \frac{\partial}{\partial \beta} + \frac{1}{\sin^2 \beta} \left(\frac{\partial^2}{\partial \gamma^2} - 2 \cos \beta \frac{\partial^2}{\partial \gamma \partial \alpha} + \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} \right) - 2 \frac{\partial^2}{\partial \gamma^2} \right]$$

$$H_\kappa = \frac{1}{2\mu_1 \vartheta^3} \left[\frac{\hbar}{i} e^{-i\gamma} \left(\cot \beta \frac{\partial}{\partial \gamma} + i \frac{\partial}{\partial \beta} - \frac{1}{\sin \beta} \frac{\partial}{\partial \alpha} \right) \left(\cot u \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \gamma} + \hbar \frac{\partial}{\partial u} \right) + \right. \\ \left. + \frac{\hbar}{i} e^{i\gamma} \left(\cot \beta \frac{\partial}{\partial \gamma} - i \frac{\partial}{\partial \beta} - \frac{1}{\sin \beta} \frac{\partial}{\partial \alpha} \right) \left(\cot u \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \gamma} - \hbar \frac{\partial}{\partial u} \right) \right]$$

Weshalb wir die Operatoren auf diese Weise in Klammern zusammenfassen, wird im folgenden Abschnitt D verständlich.

Diese Schrödingergleichung stimmt im kinetischen Anteil mit derjenigen überein, die HYLLERAAS [8] bei der Berechnung des Grundzustandes von Helium erhält. HYLLERAAS ersetzt in seiner Arbeit das Heliumatom näherungsweise durch 2 Elektronen im Zentralfeld, indem er sich den Kern unendlich schwer denkt. Die beiden Elektronen beschreibt er mit denselben 6 Koordinaten, die wir für unsere 2 reduzierten Massen verwenden. Der Ausdruck für die kinetische Energie ist daher in beiden Fällen der gleiche, wenn wir für μ_1 und μ_2 je die Elektronenmasse einsetzen. Das entspricht im wirklichen 3-Teilchen-System dem Fall: m_1 unendlich schwer, $m_2 = m_3 =$ Elektronenmasse. Bei dieser Wahl geht für die äußeren Koordinaten α, β, γ das einfache Verhalten bei Teilchenvertauschung verloren, da die ζ -Achse von der η - in die r -Richtung übergeht. Für den Grundzustand ist das bedeutungslos, für Zustände mit Drehimpuls $l \neq 0$ wird es jedoch wesentlich.

D. ZERLEGUNG DES DREHIMPULSOPERATORS AUF KÖRPERGEBUNDENE AXSEN

Für die Lösungstheorie von drehinvarianten Systemen spielt der Drehimpuls als Erhaltungsgröße eine wichtige Rolle. Im folgenden erweist es sich als zweckmäßig, den raumfesten Gesamtdrehimpuls L auf die Achsen des körpergebundenen Koordinatensystems zu zerlegen. Diese Komponenten nennen wir kurz körpergebundene Komponenten. Man erhält sie entweder aus infinitesimalen Drehungen um die ξ -, η - und ζ -Achse oder durch Projektion der raumfesten Komponenten L_x, L_y, L_z auf diese Achsen. Während in der klassischen Physik der raumfeste Drehimpulsvektor immer ohne Schwierigkeiten auch auf mitbewegte Achsen zerlegt werden kann, ist beim quantenmechanischen Drehimpulsoperator Vorsicht geboten, denn die körpergebundenen Komponenten zeigen ein anderes Verhalten als die raumfesten. Die auftretenden Probleme wurden in [4] erörtert. Wir wollen hier nicht näher darauf eingehen, sondern stellen nur die Ausdrücke bereit, die wir später brauchen.

Die körpergebundenen Komponenten von L sind in unserem Fall:

$$L_{\xi} = \frac{\hbar}{i} \left(\sin \gamma \frac{\partial}{\partial \beta} - \frac{\cos \gamma}{\sin \beta} \frac{\partial}{\partial \alpha} + \cot \beta \cos \gamma \frac{\partial}{\partial \gamma} \right)$$

$$L_{\eta} = \frac{\hbar}{i} \left(\cos \gamma \frac{\partial}{\partial \beta} + \frac{\sin \gamma}{\sin \beta} \frac{\partial}{\partial \alpha} - \cot \beta \sin \gamma \frac{\partial}{\partial \gamma} \right)$$

$$L_{\zeta} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \gamma}$$

Sie genügen den folgenden "anormalen" Vertauschungsrelationen:

$$L_{\xi} L_{\eta} - L_{\eta} L_{\xi} = \frac{\hbar}{i} L_{\zeta} \text{ und zyklisch.}$$

Diese unterscheiden sich von den Vertauschungsrelationen der raumfesten Komponenten $L_x L_y - L_y L_x = \frac{\hbar}{i} L_z$ (und zykl.) durch ein Minuszeichen.

Wir definieren noch folgende Operatoren:

$$L_{+} = L_{\xi} + i L_{\eta} = \frac{\hbar}{i} e^{-i\gamma} \left(\cot \beta \frac{\partial}{\partial \gamma} + i \frac{\partial}{\partial \beta} - \frac{1}{\sin \beta} \frac{\partial}{\partial \alpha} \right)$$

$$L_{-} = L_{\xi} - i L_{\eta} = \frac{\hbar}{i} e^{i\gamma} \left(\cot \beta \frac{\partial}{\partial \gamma} - i \frac{\partial}{\partial \beta} - \frac{1}{\sin \beta} \frac{\partial}{\partial \alpha} \right)$$

$$L^2 = L_{\xi}^2 + L_{\eta}^2 + L_{\zeta}^2 =$$

$$= -\hbar^2 \left[\frac{\partial^2}{\partial \beta^2} + \cot \beta \frac{\partial}{\partial \beta} + \frac{1}{\sin^2 \beta} \left(\frac{\partial^2}{\partial \gamma^2} - 2 \cos \beta \frac{\partial^2}{\partial \gamma \partial \alpha} + \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} \right) \right]$$

Das ist derselbe Ausdruck wie für die Quadratsumme der raumfesten Komponenten.

Mit diesen Operatoren läßt sich die Schrödingergleichung wie folgt schreiben:

$$\left\{ H_i + \frac{1}{2\mu s^2} (L^2 - 2L_{\zeta}^2) + \frac{1}{2\mu s^2} \left[L_{+} (\cot u L_{\zeta} + \hbar \frac{\partial}{\partial u}) + L_{-} (\cot u L_{\zeta} - \hbar \frac{\partial}{\partial u}) \right] \right\} \Psi = E \Psi$$

Eine ähnliche Zusammenfassung wurde von MANNEBACK angegeben (mündliche Mitteilung).

E. INVARIANZEN DES HAMILTONOPERATORS

Wir wollen jetzt die Invarianzen des Hamiltonoperators ausnutzen, um Hinweise auf die Gestalt der Eigenfunktionen zu bekommen.

I. Drehinvarianz:

Da die potentielle Energie nur von den inneren Koordinaten abhängt, ist unser Hamiltonoperator drehinvariant. Die Eigenfunktionen lassen sich dann nach den Darstellungskoeffizienten der Drehgruppe entwickeln (siehe z.B. E.P. WIGNER: Group Theory and its Application to the Quantum Mechanics of Atomic Spectra 1959). In den Entwicklungskoeffizienten kommen nur noch die inneren Koordinaten ϑ , φ und χ vor, die von einer Drehung nicht berührt werden.

Die Darstellungskoeffizienten der Drehgruppe, die gleichzeitig die Eigenfunktionen von L^2 sind, werden von den einzelnen Autoren verschieden definiert. Im Laufe dieser Arbeit hat sich gezeigt, daß es zweckmäßig ist, mit den $D_{mn}^{l*}(\alpha\beta\gamma)$ von ROSE [9] zu rechnen. Man vermeidet dadurch unter anderem Faktoren wie $(-1)^{m-n}$. Wir notieren jetzt einige Eigenschaften dieser $D_{mn}^{l*}(\alpha\beta\gamma)$:

$$D_{mn}^{l*}(\alpha\beta\gamma) = e^{im\alpha} d_{mn}^l(\beta) e^{in\gamma}$$

$$\int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} D_{mn}^l(\alpha\beta\gamma) D_{m'n'}^{l'*}(\alpha\beta\gamma) d\alpha \sin\beta d\beta d\gamma = \frac{8\pi^2}{2l+1} \delta_{mm'} \delta_{nn'} \delta_{ll'}$$

$$L^2 D_{mn}^{l*} = \hbar^2 l(l+1) D_{mn}^{l*}, \quad L_3 D_{mn}^{l*} = \hbar n D_{mn}^{l*}$$

l ist die Quantenzahl des Gesamtdrehimpulses,
 m die Projektion auf die raumfeste Z-Achse und
 n die Projektion auf die körpergebundene $\mathfrak{Z}$ -Achse.

$$L_+ D_{mn}^{l*} = \hbar \sqrt{(l+n)(l-n+1)} D_{m n-1}^{l*}$$

$$L_- D_{mn}^{l*} = \hbar \sqrt{(l-n)(l+n+1)} D_{m n+1}^{l*}$$

Dieser andere Schraubsinn von L_+ und L_- im Vergleich zu den entsprechenden raumfesten Operatoren folgt aus den anomalen Vertauschungsrelationen.

Die Drehinvarianz des Hamiltonoperators liefert also folgende Gestalt der Eigenfunktionen für einen Zustand mit gegebenem l und m :

$$\Psi_m^l(\vartheta, \tau, u, \alpha, \beta, \gamma) = \sum_{n=-l}^{n+l} \phi_{mn}^l(\vartheta, \tau, u) D_{mn}^{l*}(\alpha, \beta, \gamma)$$

Die Projektionsquantenzahl n nimmt im allgemeinen alle Werte von $-l$ bis $+l$ an, da unser Hamiltonoperator einen Teil, nämlich H_K , enthält, der gegenüber Drehungen um die z -Achse nicht invariant ist. Zur vollständigen Lösung der Schrödingergleichung müssen wir jetzt noch die $2l+1$ unbekannten Funktionen $\phi_{mn}^l(\vartheta, \tau, u)$ bestimmen.

II. Parität:

Der Hamiltonoperator unseres Systems ist invariant gegen Spiegelung am Ursprung. Die Eigenfunktionen besitzen daher Parität: $P\Psi = \pm\Psi$. An der Zeichnung im Abschnitt B) haben wir uns bereits überlegt, wie der Paritätsoperator P auf die Koordinaten wirkt; damit können wir jetzt berechnen:

$$P D_{mn}^{l*}(\alpha, \beta, \gamma) = D_{mn}^{l*}(\pi + \alpha, \pi - \beta, \pi - \gamma) = (-1)^{l+n} D_{m-n}^{l*}(\alpha, \beta, \gamma)$$

Mit dieser Überlegung läßt sich unser Lösungsansatz weiter einschränken. Wir bilden dazu Funktionen mit bestimmter Parität:

$$\mathcal{L}_{mn}^{l\pm}(\alpha, \beta, \gamma) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ D_{mn}^{l*}(\alpha, \beta, \gamma) \pm (-1)^{l+n} D_{m-n}^{l*}(\alpha, \beta, \gamma) \right\} \quad n \neq 0$$

$$\mathcal{L}_{m0}^{l\pm}(\alpha, \beta, \gamma) = \frac{1}{2} \left\{ D_{m0}^{l*}(\alpha, \beta, \gamma) \pm (-1)^l D_{m0}^{l*}(\alpha, \beta, \gamma) \right\} \quad n = 0$$

Die Funktionen $\mathcal{L}_{mn}^{l+}$ haben positive, $\mathcal{L}_{mn}^{l-}$ negative Parität:

$P\mathcal{L}_{mn}^{l\pm} = \pm\mathcal{L}_{mn}^{l\pm}$, $\mathcal{L}_{m0}^{l+} = 0$ für l ungerade, $\mathcal{L}_{m0}^{l-} = 0$ für l gerade.

Der Faktor $\frac{1}{\sqrt{2}}$ bzw. $\frac{1}{2}$ dient nur dazu, daß die $\mathcal{L}_{mn}^{\ell\pm}$ dieselbe Normierung besitzen wie die $\mathcal{D}_{mn}^{\ell*}$.

Unsere Lösungsfunktionen mit definierter Parität werden dann:

$$\Psi_m^{\ell\pm} = \sum_{n=0, n \neq 1}^{\ell} \phi_{mn}^{\ell\pm}(\vartheta\tau u) \mathcal{L}_{mn}^{\ell\pm}(\alpha\beta\gamma); \quad P\Psi_m^{\ell\pm} = \pm \Psi_m^{\ell\pm}$$

Auf Grund dieser Paritätsüberlegung reduziert sich für einen Zustand mit Drehimpuls ℓ und gegebener Parität die Zahl der unbekannten Funktionen $\phi_{mn}^{\ell\pm}$ auf ℓ bzw. $\ell+1$.

III. Teilchenvertauschung:

Wir betrachten jetzt den Fall, daß 2 Teilchen gleich sind. Dann ist der Hamiltonoperator invariant gegen Vertauschung der beiden Teilchen, und die Wellenfunktion verhält sich entweder symmetrisch oder antisymmetrisch bei dieser Operation. Die beiden gleichen Teilchen werden bei unserer Wahl der Koordinaten Teilchen 1 und 2. Wie sich bei ihrer Vertauschung die Koordinaten ändern, haben wir bereits in Abschnitt B angegeben. Damit können wir die Wirkung des Austauschoperators E_{12} auf unseren Lösungsansatz berechnen:

$$E_{12} \mathcal{D}_{mn}^{\ell*}(\alpha\beta\gamma) = \mathcal{D}_{mn}^{\ell*}(\pi+\alpha, \pi-\beta, 2\pi-\gamma) = (-1)^{\ell} \mathcal{D}_{m-n}^{\ell*}(\alpha\beta\gamma)$$

$$E_{12} \mathcal{L}_{mn}^{\ell\pm}(\alpha\beta\gamma) = \pm (-1)^n \mathcal{L}_{mn}^{\ell\pm}(\alpha\beta\gamma)$$

$$\begin{aligned} E_{12} \Psi_m^{\ell\pm} &= E_{12} \sum_n \phi_{mn}^{\ell\pm} \mathcal{L}_{mn}^{\ell\pm} = \sum_n (E_{12} \phi_{mn}^{\ell\pm}) \cdot (E_{12} \mathcal{L}_{mn}^{\ell\pm}) = \\ &= \pm \sum_n (E_{12} \phi_{mn}^{\ell\pm}) \cdot (-1)^n \mathcal{L}_{mn}^{\ell\pm} = \left(\frac{\pm}{\pm}\right) \Psi_m^{\ell\pm} \end{aligned}$$

$$\rightarrow E_{12} \phi_{mn}^{\ell\pm}(\vartheta\tau u) = \phi_{mn}^{\ell\pm}(\vartheta\tau \pi-u) = \pm (-1)^n \phi_{mn}^{\ell\pm}(\vartheta\tau u)$$

Wir führen die 4 verschiedenen Fälle einzeln auf:

$$E_{12} \psi_m^{l+} = + \psi_m^{l+} \longrightarrow E_{12} \phi_{mn}^{l+} = + (-1)^n \phi_{mn}^{l+}$$

$$E_{12} \psi_m^{l+} = - \psi_m^{l+} \longrightarrow E_{12} \phi_{mn}^{l+} = - (-1)^n \phi_{mn}^{l+}$$

$$E_{12} \psi_m^{l-} = + \psi_m^{l-} \longrightarrow E_{12} \phi_{mn}^{l-} = - (-1)^n \phi_{mn}^{l-}$$

$$E_{12} \psi_m^{l-} = - \psi_m^{l-} \longrightarrow E_{12} \phi_{mn}^{l-} = + (-1)^n \phi_{mn}^{l-}$$

Diese Überlegungen verringern die Anzahl der Funktionen $\phi_{mn}^{l\pm}$, die für einen Zustand mit gegebenen Quantenzahlen zu bestimmen sind, nicht weiter, wie dies bei der Parität der Fall war, sondern liefern eine Aussage über die Funktionen $\phi_{mn}^{l\pm}$ selbst. Wir werden deshalb die Lösungstheorie für die äußeren Koordinaten ohne Spezialisierung auf 2 gleiche Teilchen durchführen und erst im Laufe der Lösungstheorie für die inneren Koordinaten wieder darauf zurückkommen.

F. LÖSUNGSTHEORIE FÜR DIE ÄUSSEREN KOORDINATEN

Wir müssen nun den Hamiltonoperator auf unseren Lösungsansatz

$\psi_m^{l\pm}(sru, \alpha\beta\gamma) = \sum_n \phi_{mn}^{l\pm}(sru) \mathcal{L}_{mn}^{l\pm}(\alpha\beta\gamma)$ wirken lassen und die $\mathcal{L}_{mn}^{l\pm}(\alpha\beta\gamma)$ abseparieren, damit wir Bestimmungsgleichungen für die unbekannten Funktionen $\phi_{mn}^{l\pm}(sru)$ erhalten. Dazu berechnen wir zunächst, wie die einzelnen in der Schrödingergleichung vorkommenden Operatoren auf die Funktionen $\mathcal{L}_{mn}^{l\pm}(\alpha\beta\gamma)$ wirken. Das ist mit den Beziehungen von Abschnitt E sehr einfach:

$$L^2 \mathcal{L}_{mn}^{l\pm} = \hbar^2 l(l+1) \mathcal{L}_{mn}^{l\pm}, \quad L_z^2 \mathcal{L}_{mn}^{l\pm} = \hbar^2 n^2 \mathcal{L}_{mn}^{l\pm}$$

$$H_i \mathcal{L}_{mn}^{l\pm} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu_1} \left(\frac{\partial^2}{\partial s^2} + \frac{2}{s} \frac{\partial}{\partial s} \right) - \frac{\hbar^2}{2\mu_2} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) - \right. \\ \left. - \left(\frac{\hbar^2}{2\mu_1 s^2} + \frac{\hbar^2}{2\mu_2 r^2} \right) \left(\frac{\partial^2}{\partial u^2} + \cot u \frac{\partial}{\partial u} - \frac{n^2}{\sin^2 u} \right) + V(s+r) \right\} \mathcal{L}_{mn}^{l\pm} \stackrel{\text{Def.}}{=} H_{in} \mathcal{L}_{mn}^{l\pm}$$

$$H_\alpha \mathcal{L}_{mn}^{l\pm} = \frac{\hbar^2}{2\mu_1 s^2} \{ l(l+1) - 2n^2 \} \mathcal{L}_{mn}^{l\pm}$$

$$H_{in} + \frac{\hbar^2}{2\mu_1 s^2} \{ l(l+1) - 2n^2 \} \stackrel{\text{Def.}}{=} H_{in}^l$$

$$H_K \mathcal{L}_{mn}^{l\pm} = \frac{\hbar^2}{2\mu_1 s^2} \left\{ \sqrt{(l-n)(l+n+1)} \left(n \cot u - \frac{\partial}{\partial u} \right) \mathcal{L}_{mn+1}^{l\pm} + \right. \\ \left. + \sqrt{(l+n)(l-n+1)} \left(n \cot u + \frac{\partial}{\partial u} \right) \mathcal{L}_{mn-1}^{l\pm} \right\} = \\ = b_{n+1}^l \mathcal{L}_{mn+1}^{l\pm} - b_{-(n-1)}^l \mathcal{L}_{mn-1}^{l\pm}; \quad n \neq 0, n+1, n+l$$

$$\text{mit: } b_n^l = \frac{\hbar^2}{2\mu_1 s^2} \sqrt{(l+n)(l-n+1)} \left((n-1) \cot u - \frac{\partial}{\partial u} \right)$$

Die Operatoren H_i und H_α lassen n unverändert, während H_K von n auf $n+1$ und $n-1$ schraubt. An dieser Stelle macht sich bemerkbar, daß H_i und H_α gegenüber Drehungen um die $\mathfrak{J}$ -Achse invariant sind, H_K dagegen nicht.

Das Verhalten für $n=0$, $n=1$ und $n=l$ wird getrennt untersucht:

$$l \text{ gerade: } \begin{cases} n=0 & \mathcal{L}_{m_0}^{l-} \equiv 0 & H_K \mathcal{L}_{m_0}^{l+} = \sqrt{2} b_1^l \mathcal{L}_{m_1}^{l+} \\ n=1 & H_K \mathcal{L}_{m_1}^{l-} = b_2^l \mathcal{L}_{m_2}^{l-}; & H_K \mathcal{L}_{m_1}^{l+} = b_2^l \mathcal{L}_{m_2}^{l+} - \sqrt{2} b_{-0}^l \mathcal{L}_{m_0}^{l+} \end{cases}$$

$$l \text{ ungerade: } \begin{cases} n=0 & \mathcal{L}_{m_0}^{l+} \equiv 0 & H_K \mathcal{L}_{m_0}^{l-} = \sqrt{2} b_1^l \mathcal{L}_{m_1}^{l-} \\ n=1 & H_K \mathcal{L}_{m_1}^{l+} = b_2^l \mathcal{L}_{m_2}^{l+}; & H_K \mathcal{L}_{m_1}^{l-} = b_2^l \mathcal{L}_{m_2}^{l-} - \sqrt{2} b_{-0}^l \mathcal{L}_{m_0}^{l-} \end{cases}$$

$$\text{für alle } l: \quad n=l \quad H_K \mathcal{L}_{m_l}^{l\pm} = -b_{-(l-1)}^l \mathcal{L}_{m_{l-1}}^{l\pm}$$

Wir wenden jetzt den Hamiltonoperator auf unsere Lösungsfunktion an, und zwar zunächst ohne Berücksichtigung der Sonderfälle $n=0$, $n=1$ und $n=l$:

$$\begin{aligned} (H-E) \Psi_m^{l\pm} &= (H_i + H_\alpha + H_K - E) \sum_n \phi_{mn}^{l\pm} \mathcal{L}_{mn}^{l\pm} = \\ &= \sum_n \left\{ (H_{in}^l - E) \phi_{mn}^{l\pm} \mathcal{L}_{mn}^{l\pm} + b_{n+1}^l \phi_{mn}^{l\pm} \mathcal{L}_{m,n+1}^{l\pm} - b_{-(n-1)}^l \phi_{mn}^{l\pm} \mathcal{L}_{m,n-1}^{l\pm} \right\} = \\ &= \sum_n \left\{ (H_{in}^l - E) \phi_{mn}^{l\pm} + b_n^l \phi_{m,n-1}^{l\pm} - b_{-n}^l \phi_{m,n+1}^{l\pm} \right\} \mathcal{L}_{mn}^{l\pm} = 0 \end{aligned}$$

Die Funktionen $\mathcal{L}_{mn}^{l\pm}$ sind linear unabhängig; es muß daher jede Klammer für sich verschwinden. Zusammen mit den bereits untersuchten Sonderfällen $n=0$, $n=1$ und $n=l$ erhalten wir so zu jeder Parität und jedem Drehimpuls ein System von gekoppelten Differentialgleichungen für die Funktionen $\phi_{mn}^{l\pm}$. Zur besseren Übersicht schreiben wir die auftretenden Fälle ausführlich hin.

Positive Parität

$$\underline{\ell = 0}$$

$$(H_{i0}^0 - E) \phi_{m0}^{0+} = 0$$

$$\underline{\ell = 1}$$

$$(H_{i1}^1 - E) \phi_{m1}^{1+} = 0$$

$$\underline{\ell = 2}$$

$$(H_{i0}^2 - E) \phi_{m0}^{2+} - \sqrt{2} b_{-0}^2 \phi_{m1}^{2+} = 0$$

$$\sqrt{2} b_1^2 \phi_{m0}^{2+} + (H_{i1}^2 - E) \phi_{m1}^{2+} - b_{-1}^2 \phi_{m2}^{2+} = 0$$

$$b_2^2 \phi_{m1}^{2+} + (H_{i2}^2 - E) \phi_{m2}^{2+} = 0$$

$$\underline{\ell \text{ ungerade}}$$

$$(H_{i1}^\ell - E) \phi_{m1}^{\ell+} - b_{-1}^\ell \phi_{m2}^{\ell+} = 0$$

$$b_2^\ell \phi_{m1}^{\ell+} + (H_{i2}^\ell - E) \phi_{m2}^{\ell+} - b_{-2}^\ell \phi_{m3}^{\ell+} = 0$$

$$b_n^\ell \phi_{mn-1}^{\ell+} + (H_{in}^\ell - E) \phi_{mn}^{\ell+} - b_{-n}^\ell \phi_{mn+1}^{\ell+} = 0$$

$$b_\ell^\ell \phi_{m\ell-1}^{\ell+} + (H_{i\ell}^\ell - E) \phi_{m\ell}^{\ell+} = 0$$

ℓ gerade

$$(H_{i0}^{\ell} - E) \phi_{m0}^{\ell+} - \sqrt{2} b_{-0}^{\ell} \phi_{m1}^{\ell+} = 0$$

$$\sqrt{2} b_{-1}^{\ell} \phi_{m0}^{\ell+} + (H_{i1}^{\ell} - E) \phi_{m1}^{\ell+} - b_{-1}^{\ell} \phi_{m2}^{\ell+} = 0$$

$$b_{-2}^{\ell} \phi_{m1}^{\ell+} + (H_{i2}^{\ell} - E) \phi_{m2}^{\ell+} - b_{-2}^{\ell} \phi_{m3}^{\ell+} = 0$$

— — — — —

$$b_{-n}^{\ell} \phi_{mn-1}^{\ell+} + (H_{in}^{\ell} - E) \phi_{mn}^{\ell+} - b_{-n}^{\ell} \phi_{mn+1}^{\ell+} = 0$$

— — — — —

$$b_{-l}^{\ell} \phi_{ml-1}^{\ell+} + (H_{il}^{\ell} - E) \phi_{ml}^{\ell+} = 0$$

Negative Parität

$\ell = 0$ existiert nicht. Der Grundzustand hat immer positive Parität.

 $\ell = 1$

$$(H_{i0}^1 - E) \phi_{m0}^{1-} - \sqrt{2} b_{-0}^1 \phi_{m1}^{1-} = 0$$

$$\sqrt{2} b_{-1}^1 \phi_{m0}^{1-} + (H_{i1}^1 - E) \phi_{m1}^{1-} = 0$$

 $\ell = 2$

$$(H_{i1}^2 - E) \phi_{m1}^{2-} - b_{-1}^2 \phi_{m2}^{2-} = 0$$

$$b_{-2}^2 \phi_{m1}^{2-} + (H_{i2}^2 - E) \phi_{m2}^{2-} = 0$$

ℓ ungerade bei negativer Parität entspricht dem Fall ℓ gerade bei positiver Parität und umgekehrt.

G. LÖSUNGSTHEORIE FÜR DIE INNEREN KOORDINATEN

Während wir für die äußeren Koordinaten α, β, γ die Lösungstheorie entwickeln konnten, ohne irgendwelche Annahmen über die Form der potentiellen Energie zu machen, ist das für die inneren Koordinaten g, r, u nicht mehr möglich, da die potentielle Energie im allgemeinen von allen 3 inneren Koordinaten abhängt. Die Funktionen $\phi_{mn}^{l\pm}(g, r, u)$ unterscheiden sich also für die einzelnen 3-Körper-Probleme, und wir können sie nicht weiter bestimmen, ohne das Potential zu kennen. Wir müssen für jedes 3-Teilchen-System mit dem dazugehörigen Potential das Eigenwertproblem lösen, das durch die gekoppelten Differentialgleichungen gegeben ist. Eine exakte Lösung mit bekannten Funktionen wird allerdings nur in ganz speziellen Fällen möglich sein; alle übrigen müssen numerisch oder mit Störungsrechnung behandelt werden. Um dafür einen Ansatzpunkt zu bekommen, suchen wir zunächst spezielle Potentiale, für die das 3-Körper-Problem exakt lösbar ist, und diskutieren diese Lösungen. Dazu gehen wir nicht von den gekoppelten Differentialgleichungen aus, sondern wählen einen anderen Weg, der uns ohne viel Rechnung zum Ziel führt.

I. Spezielle Lösung im raumfesten Koordinatensystem:

Wir erinnern uns an die in Abschnitt B erwähnte Möglichkeit, die 2 reduzierten Massen im raumfesten $X Y Z$ - System mit den sphärischen Polarkoordinaten $g, \vartheta_1, \varphi_1$ und $r, \vartheta_2, \varphi_2$ zu beschreiben. In diesen Koordinaten können wir den Hamiltonoperator sofort angeben:

$$H(g, \vartheta_1, \varphi_1, r, \vartheta_2, \varphi_2) = -\frac{\hbar^2}{2\mu_1} \Delta(g, \vartheta_1, \varphi_1) - \frac{\hbar^2}{2\mu_2} \Delta(r, \vartheta_2, \varphi_2) + V(g, \vartheta_1, \varphi_1, r, \vartheta_2, \varphi_2)$$

Dabei bedeutet $\Delta(g, \vartheta_1, \varphi_1)$ bzw. $\Delta(r, \vartheta_2, \varphi_2)$ den Laplace-Operator in den entsprechenden Koordinaten.

Wir betrachten jetzt den Fall, daß zwischen den beiden reduzierten Massen keine Wechselwirkung vorhanden ist: die poten-

tielle Energie hat dann die Form $V(\vartheta_1 \varphi_1, r \vartheta_2 \varphi_2) = V_1(\vartheta_1 \varphi_1) + V_2(r \vartheta_2 \varphi_2)$, und der Hamiltonoperator ist separierbar in $H(\vartheta_1 \varphi_1, r \vartheta_2 \varphi_2) = H_1(\vartheta_1 \varphi_1) + H_2(r \vartheta_2 \varphi_2)$. Berücksichtigen wir noch, daß die potentielle Energie bei unseren 3-Teilchen-Systemen nur von den inneren Koordinaten ϑ , r , u abhängt, so erhalten wir folgende Bedingung: $V_1(\vartheta_1 \varphi_1) + V_2(r \vartheta_2 \varphi_2) = V(\vartheta r u)$. Das heißt: einerseits ist die potentielle Energie jeder der beiden reduzierten Massen allein durch deren Lage relativ zum raumfesten System bestimmt, während andererseits die potentielle Energie nur von der relativen Lage der beiden Massen zueinander abhängen soll. Diese beiden Forderungen zusammen sind nur dann erfüllt, wenn in der potentiellen Energie die Winkel überhaupt nicht vorkommen, also $V = V_1(\vartheta) + V_2(r)$ ist. Wir haben damit 2 voneinander unabhängige Teilchen in einem Zentralfeld, wobei die radiale Abhängigkeit des Potentials für beide Teilchen verschieden sein kann. Dieses Problem läßt sich sofort weiter lösen: Man separiert die Winkel $\vartheta_1 \varphi_1$ und $\vartheta_2 \varphi_2$ ab und erhält 2 unabhängige Differentialgleichungen für ϑ und r . Als Eigenfunktion für die reduzierte Masse μ_1 bekommen wir: $P_{i l_1}(\vartheta) Y_{l_1 m_1}(\vartheta_1 \varphi_1)$ und für μ_2 : $R_{k l_2}(r) Y_{l_2 m_2}(\vartheta_2 \varphi_2)$. Dabei sind $Y_{l_v m_v}(\vartheta_v \varphi_v)$ die Eigenfunktionen des raumfesten Bahndrehimpulsoperators L_v^2 [9]. l_v ist die Quantenzahl des Bahndrehimpulses und m_v die Projektion auf die raumfeste Z-Achse. $P_{i l_1}(\vartheta)$ und $R_{k l_2}(r)$ sind die zu den speziellen Potentialen $V_1(\vartheta)$ und $V_2(r)$ gehörenden Radialfunktionen. Die uns interessierenden Lösungen müssen einen scharfen Gesamtdrehimpuls mit der Quantenzahl l und der Projektion m auf die Z-Achse und Parität besitzen. Wir bilden deshalb die entsprechende Linearkombination und erhalten als Lösung für das Gesamtsystem:

$$\Psi_m^{l l_1 l_2}(\vartheta_1 \varphi_1, r \vartheta_2 \varphi_2) = P_{i l_1}(\vartheta) R_{k l_2}(r) \sum_{m_1 + m_2 = m} C(l_1 l_2 l, m_1 m_2 m) Y_{l_1 m_1}(\vartheta_1 \varphi_1) Y_{l_2 m_2}(\vartheta_2 \varphi_2)$$

$C(l_1 l_2 l, m_1 m_2 m)$ sind die Clebsch-Gordan-Koeffizienten. Die Parität dieser Lösung ist $(-1)^{l_1 + l_2}$, denn die Funktionen $Y_{l_v m_v}(\vartheta_v \varphi_v)$ haben in diesem Fall die Parität $(-1)^{l_v}$.

Kehren wir nun zu den Koordinaten $gru, \alpha\beta\gamma$ zurück. Wir haben gefunden, daß sich in diesen Koordinaten jede Lösung wie folgt schreiben läßt:

$$\Psi_m^{\ell\pm}(gru, \alpha\beta\gamma) = \sum_n \Phi_{mn}^{\ell\pm}(gru) \mathcal{L}_{mn}^{\ell\pm}(\alpha\beta\gamma)$$

Ein Vergleich mit der obigen Lösung im raumfesten System zeigt, daß für das spezielle von u unabhängige Potential $V = V_1(g) + V_2(r)$ gelten muß:

$$\Phi_{mn}^{\ell\pm}(gru) = P_{i\ell_1}(g) R_{k\ell_2}(r) \chi_{mn}^{\ell\ell_1\ell_2\pm}(u)$$

Nun hängen die Winkel $\vartheta_1, \varphi_1; \vartheta_2, \varphi_2$ eindeutig mit den Winkeln α, β, γ, u zusammen, und die Funktionen $Y_{\ell_1 m_1}(\vartheta_1 \varphi_1), Y_{\ell_2 m_2}(\vartheta_2 \varphi_2)$ und $\mathcal{L}_{mn}^{\ell\pm}(\alpha, \beta, \gamma)$ sind bekannt. Wir können also die unbekannten Funktionen $\chi_{mn}^{\ell\ell_1\ell_2\pm}(u)$ bestimmen, indem wir die raumfeste Lösung einfach umrechnen. Die Koordinaten g und r werden von der Umrechnung nicht betroffen. An dieser Stelle sehen wir, daß der Winkel u für die Lösungstheorie der inneren Koordinaten eine besondere Rolle spielt. Wir beschäftigen uns deshalb zuerst mit der u -Abhängigkeit. Damit die Rechnungen von nicht benötigten Ausdrücken frei sind und dadurch übersichtlicher werden, lassen wir die g - und r -Abhängigkeit vorläufig außer Acht. Wenn wir dann die u -Abhängigkeit verstanden und physikalisch gedeutet haben, können wir die Abhängigkeit von g und r ohne zusätzliche Schwierigkeiten wieder mitnehmen.

II. Umrechnung der raumfesten Lösung

Die Umrechnung selbst ist nicht schwierig, wenn man die Transformationseigenschaften der Kugelfunktionen bei Drehungen benützt. Es gilt:

$$Y_{\ell_2 m_2}(\vartheta_2 \varphi_2) = \sum_{n=-\ell_2}^{\ell_2} \mathcal{D}_{m_2 n}^{\ell_2*}(\alpha\beta\gamma) Y_{\ell_2 n}(u, 0)$$

Die Kugelfunktionen hängen mit den Darstellungskoeffizienten zusammen:

$$Y_{\ell_1 m_1}(\vartheta_1 \varphi_1) = \sqrt{\frac{2\ell_1+1}{4\pi}} \mathcal{D}_{m_1 0}^{\ell_1*}(\varphi_1 \vartheta_1 0)$$

Da $\varphi_1 = \alpha$, $\vartheta_1 = \beta$ ist und $\mathcal{D}_{m_1 0}^{\ell_1*}$ vom dritten Winkel nicht abhängt, können wir schreiben:

$$Y_{\ell_1 m_1}(\vartheta_1 \varphi_1) = \sqrt{\frac{2\ell_1+1}{4\pi}} \mathcal{D}_{m_1 0}^{\ell_1*}(\alpha \beta \gamma)$$

Wir setzen das in unsere raumfeste Lösung ein:

$$\begin{aligned} \Psi_m^{\ell_1 \ell_2 \pm}(\vartheta_1 \varphi_1, \vartheta_2 \varphi_2) &= \sum_{m_1+m_2=m} C(\ell_1 \ell_2 \ell, m_1 m_2 m) Y_{\ell_1 m_1}(\vartheta_1 \varphi_1) Y_{\ell_2 m_2}(\vartheta_2 \varphi_2) = \\ &= \sum_{m_1+m_2=m} C(\ell_1 \ell_2 \ell, m_1 m_2 m) \sqrt{\frac{2\ell_1+1}{4\pi}} \mathcal{D}_{m_1 0}^{\ell_1*}(\alpha \beta \gamma) \sum_{n=-\ell_2}^{\ell_2} \mathcal{D}_{m_2 n}^{\ell_2*}(\alpha \beta \gamma) Y_{\ell_2 n}(u, 0) = \\ &= \Psi_m^{\ell \pm}(u, \alpha \beta \gamma). \end{aligned}$$

Diesen Ausdruck formen wir mit der folgenden Beziehung [9] weiter um:

$$\sum_{m_1+m_2=m} C(\ell_1 \ell_2 \ell, m_1 m_2 m) \mathcal{D}_{m_1 n_1}^{\ell_1*}(\alpha \beta \gamma) \mathcal{D}_{m_2 n_2}^{\ell_2*}(\alpha \beta \gamma) = C(\ell_1 \ell_2 \ell, n_1 n_2 n_1+n_2) \mathcal{D}_{m n_1+n_2}^{\ell*}(\alpha \beta \gamma)$$

und erhalten:

$$\Psi_m^{\ell \ell_1 \ell_2 \pm}(u, \alpha \beta \gamma) = \sum_{n=-\ell_2}^{\ell_2} \sqrt{\frac{2\ell_1+1}{4\pi}} C(\ell_1 \ell_2 \ell, 0 n n) Y_{\ell_2 n}(u, 0) \mathcal{D}_{m n}^{\ell*}(\alpha \beta \gamma)$$

Um die Funktionen $\chi_{m n}^{\ell \ell_1 \ell_2 \pm}(u)$ leichter ablesen zu können, fassen wir die Glieder mit n und $-n$ zusammen. Wir verwenden dazu:

$$C(\ell_1 \ell_2 \ell, 0 -n -n) = (-1)^{\ell_1+\ell_2-\ell} C(\ell_1 \ell_2 \ell, 0 n n)$$

$$Y_{\ell_2 -n}(u, 0) = (-1)^n Y_{\ell_2 n}^*(u, 0) = (-1)^n Y_{\ell_2 n}(u, 0)$$

Damit ergibt sich:

$$\psi_m^{l_1 l_2 \pm}(u, \alpha \beta \gamma) = \sqrt{\frac{2l_1+1}{4\pi}} C(l_1 l_2 l, 000) Y_{l_2 0}(u, 0) D_{m0}^{l*}(\alpha \beta \gamma) + \\ + \sum_{n=1}^{l_2} \sqrt{\frac{2l_1+1}{4\pi}} C(l_1 l_2 l, 0nn) Y_{l_2 n}(u, 0) \{ D_{mn}^{l*}(\alpha \beta \gamma) + (-1)^{l_1+l_2} (-1)^{l+n} D_{m-n}^{l*}(\alpha \beta \gamma) \}$$

Wenn wir jetzt noch berücksichtigen, daß die Parität dieser Lösung $(-1)^{l_1+l_2}$ ist, dann sehen wir, daß die Klammern $\{ D_{mn}^{l*} + (-1)^{l_1+l_2} (-1)^{l+n} D_{m-n}^{l*} \}$ bis auf den Faktor $\frac{1}{\sqrt{2}}$ bzw. $\frac{1}{2}$ unsere Funktionen mit Parität $\mathcal{L}_{mn}^{l\pm}$ sind. Der Fall $n = 0$ paßt sich dadurch an, daß für $l_1 + l_2 + l$ ungerade $C(l_1 l_2 l, 000) = 0$ ist. Damit erhalten wir für die gesuchten Funktionen:

$$\chi_{mn}^{l l_1 l_2 \pm}(u) = \sqrt{\frac{2l_1+1}{2\pi}} C(l_1 l_2 l, 0nn) Y_{l_2 n}(u, 0) \quad n \neq 0$$

$$\chi_{m0}^{l l_1 l_2 \pm}(u) = \sqrt{\frac{2l_1+1}{4\pi}} C(l_1 l_2 l, 000) Y_{l_2 0}(u, 0)$$

Die Lösungsfunktionen mit $l_1 + l_2$ gerade gehören zu $\chi_{mn}^{l l_1 l_2 +}(u)$, die mit $l_1 + l_2$ ungerade zu $\chi_{mn}^{l l_1 l_2 -}(u)$.

III. Diskussion der umgerechneten Lösung

Als erstes stellen wir fest, daß unsere umgerechneten Lösungsfunktionen $P_{i l_1}(g) R_{l l_2}(r) \chi_{mn}^{l l_1 l_2 \pm}(u)$ von der Quantenzahl m nicht abhängen. Das gilt nicht nur für dieses spezielle Potential, sondern ganz allgemein, denn in den gekoppelten Differentialgleichungen für die $\phi_{mn}^{l\pm}(g+r)$ kommt m nicht vor. Wir können uns das anschaulich so klarmachen: Bei einer potentiellen Energie, die von den äußeren Koordinaten α, β, γ unabhängig ist, können die Anteile der Wellenfunktion, die die Lage der Massen relativ zum körpergebundenen Koordinatensystem beschreiben, nicht von der Richtung des Gesamtdrehimpulses im Raum abhängen.

Für die weitere Diskussion formen wir die Lösung mit der folgenden Beziehung noch etwas um:

$$C(l_1 l_2 l, 0 n n) = (-1)^{l_2 + n} \sqrt{\frac{2l+1}{2l_1+1}} C(l l_2 l_1, -n n 0) = (-1)^{l-l_1+n} \sqrt{\frac{2l+1}{2l_1+1}} C(l l_2 l_1, n -n 0)$$

Damit wird:

$$\Psi_m^{l l_1 l_2 \pm}(u, \alpha \beta \gamma) = (-1)^{l-l_1} \sum_{n=-l_2}^{l_2} C(l l_2 l_1, n -n 0) \sqrt{\frac{2l+1}{8\pi^2}} D_{mn}^{l*}(\alpha \beta \gamma) \sqrt{2\pi} Y_{l_2-n}(u, 0)$$

Wir betrachten jetzt die einzelnen Faktoren:

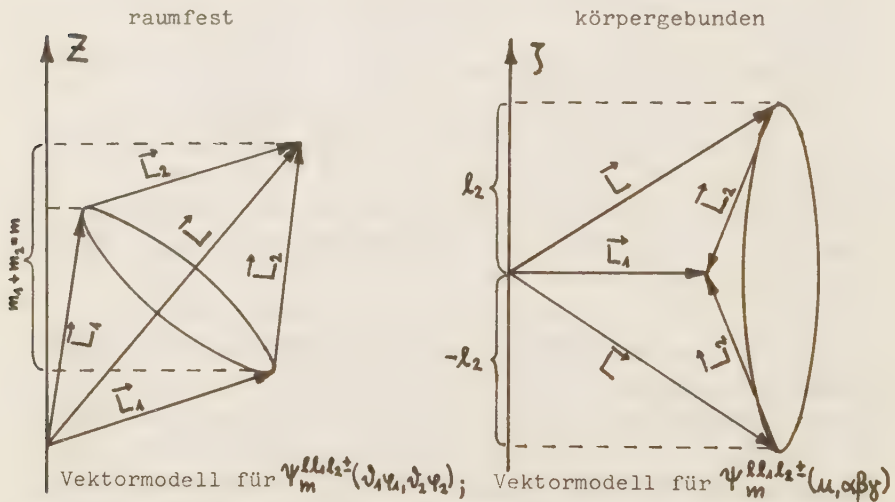
$\sqrt{\frac{2l+1}{8\pi^2}} D_{mn}^{l*}(\alpha \beta \gamma)$ kennen wir bereits, es sind die auf 1 normierten Eigenfunktionen zum Gesamtdrehimpulsoperator L^2 (s. Abschnitt E I).

Um den Faktor $\sqrt{2\pi} Y_{l_2-n}(u, 0)$ zu deuten, erinnern wir uns, woraus diese Funktionen entstanden sind. Wir haben sie erhalten, indem wir die Eigenfunktionen des Bahndrehimpulsoperators L_2^2 vom X Y Z - System auf das $\xi \eta \zeta$ -System transformiert haben. Die $Y_{l_2-n}(u, 0)$ sind also die Eigenfunktionen von L_2^2 im körpergebundenen Koordinatensystem, und $-n$ ist die Projektionsquantenzahl von L_2 auf die ζ -Achse. Die Winkel u und 0 sind die Polarwinkel von μ_2 im $\xi \eta \zeta$ -System. Der Azimutwinkel ist immer Null, weil die ξ -Achse durch μ_2 gerade so definiert wird, daß μ_2 in der $\xi\text{-}\zeta$ -Ebene liegt (s. Abschnitt B III). Wir transformieren also von einem raumfesten in ein anderes verdrehtes Koordinatensystem, das sich mit μ_2 in ganz spezieller Weise mitbewegt. Diese Besonderheit wird uns noch öfter beschäftigen. Sie ist auch der Grund dafür, daß nicht die Funktionen $Y_{l_2-n}(u, 0)$, sondern $\sqrt{2\pi} Y_{l_2-n}(u, 0)$ auf 1 normiert sind, denn das Volumenelement für das Normierungsintegral lautet in unserem Fall $dr = \sin u du d\alpha \sin \beta d\beta d\gamma$ [4], und es gilt $\int_0^\pi Y_{l_2-n}(u, 0) Y_{l_2'-n}(u, 0) \sin u du = \frac{1}{2\pi} \delta_{l_2 l_2'}$. Die Orthogonalität bezüglich der Quantenzahl n liefern die Funktionen $D_{mn}^{l*}(\alpha \beta \gamma)$.

Vergleichen wir jetzt die in den Clebsch-Gordan-Koeffizienten auftretenden Quantenzahlen $l l_2 l_1, n -n 0$ mit den Quanten-

zahlen der diskutierten Funktionen $\sqrt{\frac{2\ell+1}{8\pi^2}} D_{mn}^{\ell*}(\alpha\beta\gamma)$ und $\sqrt{2\pi} Y_{\ell,2-n}(u,0)$ und beachten die Summation über n , so sehen wir, daß unsere Funktion $\psi_m^{\ell\ell\ell\ell_2\pm}(u,\alpha\beta\gamma)$ die gleiche Form hat wie eine Clebsch-Gordan-Summe, bei der aus den Produkten der Eigenfunktionen von $\vec{L}^2$ und $\vec{L}_2^2$ eine Wellenfunktion gebildet wird, die zusätzlich Eigenfunktion von $\vec{L}_1^2 = (\vec{L} + \vec{L}_2)^2$ ist. Das Pluszeichen zwischen $\vec{L}$ und $\vec{L}_2$ werden wir gleich diskutieren. Der resultierende Drehimpuls $\vec{L}_1$ besitzt die Projektionsquantenzahl Null auf die ζ -Achse.

Wir veranschaulichen uns diese Überlegungen an zwei Bildern:



Figur 4

Diese Zeichnungen besitzen natürlich die üblichen Mängel solcher Vektormodelle.

Der scheinbare Widerspruch, daß es im raumfesten System $\vec{L}_1 + \vec{L}_2 = \vec{L}$ heißt und im körpergebundenen System $\vec{L} + \vec{L}_2 = \vec{L}_1$, löst sich auf, wenn wir bedenken, daß alle zum 1. Bild gehörenden Drehimpulsoperatoren die normalen Vertauschungs-

relationen besitzen, während die Operatoren des 2. Bildes zum Teil den normalen und zum Teil den anomalen Vertauschungsrelationen genügen, und zwar verhält sich, wie wir in IV sehen werden, $\vec{L}_2$ normal und $\vec{L}$ und $\vec{L}_1$ anomal. Nun bewirkt aber ein Übergang von $\vec{L}$ in $-\vec{L}$ einen Wechsel der Vertauschungsrelationen; d.h. wir müssen $\vec{L}_2$ durch $-\vec{L}_2$ ersetzen, damit alle 3 Operatoren des 2. Bildes die körpergebundenen anomalen Vertauschungsrelationen haben.

Als nächstes überlegen wir uns, weshalb die $\mathfrak{z}$ -Komponente von $\vec{L}_1$ Null ist: Die Masse μ_1 liegt bei unserer Definition des körpergebundenen Koordinatensystems auf der $\mathfrak{z}$ -Achse, d.h. der Bahndrehimpuls $\vec{L}_1$ von μ_1 steht immer senkrecht auf dieser Achse und hat daher keine Komponente in ihrer Richtung. Die $\mathfrak{z}$ -Komponente des Gesamtdrehimpulses wird also nur von $\vec{L}_2$ geliefert.

Damit können wir auch verstehen, warum die Summationsgrenze der umgerechneten Lösung l_2 ist, während bei dem allgemeinen Lösungsansatz die Summe bis l läuft. Für $l < l_2$ sieht das zunächst wie ein Widerspruch aus; da aber die Clebsch-Gordan-Koeffizienten $C(l, l_2, l_1, n=0)$ für $n > \text{Min}(l_2, l)$ Null sind, wird auch hier nur bis l summiert. Für $l > l_2$ sind bei unsrer speziellen Lösung alle Funktionen $\phi_{mn}^{l_2 \pm}(\vartheta, u)$ mit $l_2 < n \leq l$ Null. Das liegt an dem besonderen Potential: Wir haben zwischen μ_1 und μ_2 keine Wechselwirkung, so daß l_2 eine feste Quantenzahl ist. Im allgemeinen Lösungsansatz dagegen sind solche Wechselwirkungen enthalten. Dadurch tritt ein Drehimpulsaustausch zwischen $\vec{L}_1$ und $\vec{L}_2$ auf, und l_2 kann alle Werte annehmen. Die Projektionsquantenzahl n wird deshalb im allgemeinen Fall von l begrenzt.

Nachdem wir jetzt die Eigenschaften unsrer speziellen Lösung untersucht haben, setzen wir sie in die gekoppelten Differentialgleichungen ein, einmal, um zu sehen, wie die Funktionen $\chi_{mn}^{l_1 l_2 \pm}(u)$ eine Lösung werden, und zum anderen,

um die Differentialoperatoren auf Grund ihrer Wirkung physikalisch zu deuten.

IV Einsetzen der Lösung

Wir betrachten wieder nur die u -Abhängigkeit. Die Koordinaten $\mathfrak{g}$ und τ lassen wir dazu wie in [4] mit einem Sperrpotential bei $\mathfrak{g}_0$ bzw. τ_0 starr werden. Das Sperrpotential hat die Form $V_1(\mathfrak{g}) + V_2(\tau)$ und gehört somit zu den Potentialen, für die unsere spezielle Lösung gilt. Unser System besteht in dieser Vereinfachung aus den beiden reduzierten Massen μ_1 und μ_2 , die in den festen Abständen $\mathfrak{g}_0$ bzw. τ_0 mit den Drehimpulsen $\vec{L}_1$ und $\vec{L}_2$ um den Koordinatenursprung umlaufen. In den Differentialgleichungen kommen die Ableitungen $\frac{\partial}{\partial \mathfrak{g}}, \frac{\partial^2}{\partial \mathfrak{g}^2}, \frac{\partial}{\partial \tau}, \frac{\partial^2}{\partial \tau^2}$ nicht mehr vor. Die u -abhängigen Operatoren wirken auf die Funktionen $Y_{l_2 n}(u, 0)$ folgendermaßen:

$$-\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial u^2} + \cot u \frac{\partial}{\partial u} - \frac{n^2}{\sin^2 u} \right) Y_{l_2 n}(u, 0) = \hbar^2 l_2(l_2+1) Y_{l_2 n}(u, 0)$$

$$\hbar \left(\frac{\partial}{\partial u} - n \cot u \right) Y_{l_2 n}(u, 0) = \hbar \sqrt{(l_2-n)(l_2+n+1)} Y_{l_2 n+1}(u, 0)$$

$$\hbar \left(-\frac{\partial}{\partial u} - n \cot u \right) Y_{l_2 n}(u, 0) = \hbar \sqrt{(l_2+n)(l_2-n+1)} Y_{l_2 n-1}(u, 0)$$

Die $Y_{l_2 n}(u, 0)$ sind, wie wir von III wissen, die Eigenfunktionen des Bahndrehimpulses von μ_2 im $\{\eta\zeta$ -System. Wir können also die 3 Operatoren auf Grund ihrer Wirkung formal als die körpergebundenen, allerdings von n abhängigen Operatoren L_2^2 , L_{2+} und L_{2-} deuten. Bevor wir uns mit den Einzelheiten dieser Deutung näher beschäftigen, setzen wir noch die Funktionen $\chi_{mn}^{l_1 l_2 l_2 \pm}(u)$ in unsere gekoppelten Differentialgleichungen ein. Mit den obigen Beziehungen macht das keine Schwierigkeiten, es wird:

$$H_{in}^l \chi_{mn}^{ll_1 l_2 \pm}(u) = \left\{ \left(\frac{\hbar^2}{2\mu_1 g_0^2} + \frac{\hbar^2}{2\mu_2 \tau_0^2} \right) l_2(l_2+1) + \frac{\hbar^2}{2\mu_1 g_0^2} [\ell(\ell+1) - 2n^2] \right\} \chi_{mn}^{ll_1 l_2 \pm}(u)$$

$$b_n^l \chi_{mn-1}^{ll_1 l_2 \pm}(u) = - \frac{\hbar^2}{2\mu_1 g_0^2} [\ell, n] [\ell_2, n] \frac{C(l_1 l_2 l, 0 n-1 n-1)}{C(l_1 l_2 l, 0 n n)} \chi_{mn}^{ll_1 l_2 \pm}(u)$$

$$b_{-n}^l \chi_{mn+1}^{ll_1 l_2 \pm}(u) = \frac{\hbar^2}{2\mu_1 g_0^2} [\ell, -n] [\ell_2, -n] \frac{C(l_1 l_2 l, 0 n+1 n+1)}{C(l_1 l_2 l, 0 n n)} \chi_{mn}^{ll_1 l_2 \pm}(u)$$

mit der Abkürzung: $[\ell, n] \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{(\ell+n)(\ell-n+1)}$

Die n -te Zeile unseres Differentialgleichungssystems ergibt dann:

$$\begin{aligned} 0 &= b_n^l \chi_{mn-1}^{ll_1 l_2 \pm}(u) + (H_{in}^l - E) \chi_{mn}^{ll_1 l_2 \pm}(u) - b_{-n}^l \chi_{mn+1}^{ll_1 l_2 \pm}(u) = \\ &= \left\{ \frac{\hbar^2}{2\mu_2 \tau_0^2} l_2(l_2+1) + \frac{\hbar^2}{2\mu_1 g_0^2} [\ell_2(l_2+1) + \ell(\ell+1) - 2n^2] C(l_1 l_2 l, 0 n n) - \right. \\ &\quad \left. - [\ell, n] [\ell_2, n] C(l_1 l_2 l, 0 n-1 n-1) - [\ell, -n] [\ell_2, -n] C(l_1 l_2 l, 0 n+1 n+1) \right\} \cdot \\ &\quad \cdot \frac{1}{C(l_1 l_2 l, 0 n n)} - E \chi_{mn}^{ll_1 l_2 \pm}(u) = 0 \end{aligned}$$

Der Energieeigenwert E hängt hier scheinbar noch von n ab. Da aber die Clebsch-Gordan-Koeffizienten die Rekursionsbeziehung [9]

$$\begin{aligned} &[-l_1(l_1+1) + l_2(l_2+1) + \ell(\ell+1) - 2n^2] C(l_1 l_2 l, 0 n n) - \\ &- [\ell, n] [\ell_2, n] C(l_1 l_2 l, 0 n-1 n-1) - [\ell, -n] [\ell_2, -n] C(l_1 l_2 l, 0 n+1 n+1) = 0 \end{aligned}$$

erfüllen, erhalten wir:

$$E = \frac{\hbar^2}{2\mu_1 g_0^2} l_1(l_1+1) + \frac{\hbar^2}{2\mu_2 \tau_0^2} l_2(l_2+1)$$

Dieser Ausdruck ist für jede Zeile der gleiche. Das richtige Verhalten der Lösung an den Rändern des Gleichungssystems wird

durch die Symmetrien der Clebsch-Gordan-Koeffizienten geregelt. Unser Differentialgleichungssystem ist damit gelöst.

Das Ergebnis für den Energieeigenwert ist unmittelbar verständlich. Wir bemerken noch, daß E die Form $E_1(\vartheta) + E_2(\tau)$ hat. Wenn wir nun die ϑ - und τ -Abhängigkeit mitnehmen, erhalten wir genau wie im raumfesten Fall 2 unabhängige Differentialgleichungen für ϑ und τ .

Wir wenden uns jetzt wieder der Deutung unserer Operatoren zu. Dazu betrachten wir den Hamiltonoperator aus Abschnitt C, in dem die Differentialausdrücke $\frac{\partial}{\partial \alpha}$ usw. noch explizit vorkommen, und zwar nur den folgenden Teil, weil wir daran bereits alles Wesentliche diskutieren können:

$$-\frac{\hbar}{i} e^{-i\tau} \left[\cot \beta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + i \frac{\partial}{\partial \beta} - \frac{1}{\sin \beta} \frac{\partial}{\partial \alpha} \right] \left[-\cot u \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \hbar \frac{\partial}{\partial u} \right]$$

In Abschnitt D haben wir für $\frac{\hbar}{i} e^{-i\tau}$ mal der ersten Klammer den körpergebundenen Schrauboperator L_+ eingeführt. Nachdem dann der Hamiltonoperator auf unseren Lösungsansatz gewirkt hatte, konnten wir die zweite Klammer formal als den von n abhängigen L_2 -Operator für die Funktionen $Y_{l_2 n}(u, 0)$ deuten. Jetzt sehen wir noch eine andere Möglichkeit: Wir verwenden die Beziehung

$Y_{l_2 n}(u, 0) D_{mn}^{l*}(\alpha \beta \gamma) = Y_{l_2 n}(u, \gamma) D_{mn}^{l*}(\alpha \beta 0)$, d.h. wir nehmen $e^{i n \gamma}$ von $D_{mn}^{l*}(\alpha \beta \gamma)$ weg, schreiben es zu $Y_{l_2 n}(u, 0)$ und erhalten $Y_{l_2 n}(u, \gamma)$. Für diese Funktion ist dann $e^{-i\tau}$ mal der zweiten Klammer der normale, von n unabhängige Schrauboperator L_2 . Die erste Klammer dagegen bekommt für $D_{mn}^{l*}(\alpha \beta 0)$ erst dann die Bedeutung von L_+ wenn der gesamte Operator auf $Y_{l_2 n}(u, \gamma)$ gewirkt hat. Da nur Produkte $Y_{l_2 n} D_{mn}^{l*}$ mit gleichem n auftreten ($Y_{l_2 -n}(u, 0) = (-1)^n Y_{l_2 n}(u, 0)$), stimmt das n in den Operatoren mit dem n der dazugehörigen Funktionen immer überein. An dieser Stelle erkennen wir die Doppelrolle von γ : Einerseits gehört γ zu den Eulerschen Winkeln, die die Lage des $\xi\eta\zeta$ -Systems definieren, und andererseits ist γ der Azimutwinkel von μ_2 . Die erste Möglichkeit haben wir ausgeführt, indem wir das körpergebundene Koordinatensystem durch die Lage von μ_1 und μ_2 festgelegt haben. Den zweiten Fall erhält man,

wenn man das $\xi\eta\zeta$ -System allein durch die Lage von μ_1 bestimmt, und zwar so, daß die ξ -Achse in der $\mathbf{z}-\zeta$ -Ebene liegt. Die Euler'schen Winkel sind dann $\alpha, \beta, 0$; der Winkel γ ist in diesem System der Azimutwinkel von μ_2 . Beide Möglichkeiten sind aus dieser Sicht gleichberechtigt. Da wir aber wegen der potentiellen Energie zwischen äußeren und inneren Koordinaten unterscheiden, ist es für unser Problem sinnvoller, $\alpha\beta\gamma$ beisammen zu lassen und zuerst die Funktionen $\mathcal{L}_{mn}^{\ell\pm}(\alpha\beta\gamma)$ abzuseparieren.

Mit diesen Überlegungen haben wir jetzt die zunächst formale Einführung von $\hat{L}_2$, L_{2+} und L_{2-} für die n -abhängigen Operatoren verstanden. Die auftretenden Schwierigkeiten liegen also an der Doppelrolle von γ , und wenn wir sie immer beachten, können wir für den betrachteten Operator im weiteren $-L_+L_-$ schreiben.

An der Gestalt und dem Schraubsinn von L_- sehen wir, daß sich $\hat{L}_2$ wie ein normaler Drehimpulsoperator verhält; dieses Ergebnis haben wir in III bereits vorweggenommen. In diesem Zusammenhang betrachten wir noch einmal die Wirkung von $-L_+L_-$ auf die Funktionen $Y_{\ell_2 n} D_{mn}^{\ell*}$. Da sich die Komponenten von $\hat{L}_2$ anomal und die von $\hat{L}_2$ normal verhalten, schrauben L_+ und L_- in dieselbe Richtung, und wir bekommen $-\hbar^2 [\ell, n] [\ell_2, n] Y_{\ell_2 n-1} D_{mn-1}^{\ell*}$, also wieder ein Produkt von Eigenfunktionen, bei denen die Projektionsquantenzahlen auf die ζ -Achse gleich sind.

Die Reihenfolge der Operatoren L_+ und L_- wird jetzt ebenfalls verständlich. Dazu stellen wir zunächst fest, daß $e^{-i\gamma}$ mit keiner der beiden Klammern vertauschbar ist, wohl aber die Klammern unter sich. Das heißt, je nachdem wie wir γ deuten wollen, vertauschen wir die beiden Klammern, fassen die an erster Stelle stehende Klammer mit $e^{-i\gamma}$ zusammen und erhalten entweder $-L_+L_-$ oder $-L_-L_+$. Der erste Operator des Produkts ist dann immer der vollständige Schrauboperator. In diesem Sinne sind die Operatoren L_+ und L_- sogar vertauschbar.

V. Zusammenfassung

Wir gehen jetzt noch einen Schritt weiter und führen die Bahndrehimpulsoperatoren von μ_2 bereits in die Schrödingergleichung vom Ende des Abschnitts D ein, also noch bevor wir den Hamiltonoperator auf den Lösungsansatz anwenden. Dieser Schritt liefert uns eine einprägsame Gestalt des Hamiltonoperators, an der wir außerdem einige allgemeine Eigenschaften ablesen können. Wenn wir jedoch mit den Operatoren rechnen, müssen wir auf die in IV diskutierte Reihenfolge achten und auf unsere bisherigen Ergebnisse zurückgreifen.

Für den Hamiltonoperator erhalten wir:

$$\frac{1}{2\mu_1} \left\{ -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial s^2} + \frac{2}{s} \frac{\partial}{\partial s} \right) + \frac{1}{s^2} (L_2^2 + L_-^2 - 2L_3^2 - L_+L_- - L_-L_+) \right\} +$$

$$\frac{1}{2\mu_2} \left\{ -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} L_2^2 \right\} + V(sru)$$

Nun läßt sich der Operator $2L_3^2$ wegen $L_3 = L_{23}$ durch $2L_3L_{23}$ ersetzen. Damit können wir dann für die Klammer

$(L_2^2 + L_-^2 - L_+L_- - L_-L_+ - 2L_3^2)$ formal $(\vec{L} - \vec{L}_2)^2$ schreiben. Wir führen noch die Abkürzung $[s] \stackrel{\text{def.}}{=} -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial s^2} + \frac{2}{s} \frac{\partial}{\partial s} \right)$ ein und stellen die körpergebundene und raumfeste Darstellung einander gegenüber:

Körpergebunden:

Koordinaten $sru, \alpha\beta\gamma$

$$H = \frac{1}{2\mu_1} \{ [s] + \frac{1}{s^2} (\vec{L} - \vec{L}_2)^2 \} + \frac{1}{2\mu_2} \{ [r] + \frac{1}{r^2} L_2^2 \} + V(sru)$$

Lösung für $V(sru) = V_1(s) + V_2(r)$

$$\psi_m^{l_1 l_2 \pm}(sru, \alpha\beta\gamma) =$$

$$= P_{l_1}(s) R_{l_2}(r) \sum_{n=l_2}^{l_2} (-1)^{l-l_1} C(l l_2 l_1, n-n_0) \sqrt{\frac{2l+1}{8\pi^2}} D_{mn}^{l*}(\alpha\beta\gamma) \sqrt{2\pi} Y_{l_2-n}(u, 0)$$

Raumfest:Koordinaten $\vartheta, \vartheta_1 \varphi_1, \tau \vartheta_2 \varphi_2$

$$H = \frac{1}{2\mu_1} \left\{ [\vartheta] + \frac{1}{\vartheta^2} L_1^2 \right\} + \frac{1}{2\mu_2} \left\{ [\tau] + \frac{1}{\tau^2} L_2^2 \right\} + V(\vartheta \vartheta_1 \varphi_1, \tau \vartheta_2 \varphi_2)$$

Lösung für $V(\vartheta \vartheta_1 \varphi_1, \tau \vartheta_2 \varphi_2) = V_1(\vartheta) + V_2(\tau)$

$$\Psi_m^{\ell \ell_1 \ell_2 \pm}(\vartheta \vartheta_1 \varphi_1, \tau \vartheta_2 \varphi_2) =$$

$$= P_{i \ell_1}(\vartheta) R_{\ell \ell_2}(\tau) \sum_{m_1 + m_2 = m} C(\ell_1 \ell_2 \ell, m_1 m_2 m) Y_{\ell_1 m_1}(\vartheta_1 \varphi_1) Y_{\ell_2 m_2}(\vartheta_2 \varphi_2)$$

Man erhält also den körpergebundenen Fall formal aus dem raumfesten, indem man $\vec{L}_1$ durch $\vec{L} - \vec{L}_2$ ersetzt, und die Drehimpulse $\vec{L}$ und $\vec{L}_2$ auf die Achsen des körpergebundenen Koordinatensystems zerlegt. Dieses Ergebnis ist vom Standpunkt der klassischen Mechanik völlig klar, und wenn H die klassische Hamiltonfunktion unseres Systems wäre, würden keinerlei Schwierigkeiten auftreten. In der Quantenmechanik dagegen ist bei der Zerlegung von Drehimpulsoperatoren auf mitbewegte Achsen Vorsicht geboten.

An dieser Gestalt des Hamiltonoperators sehen wir jetzt auch den Unterschied zwischen ϑ - und τ -Richtung-Quantisierung: Wenn wir die körpergebundene Quantisierungsachse in die ϑ -Richtung legen, tritt $\vec{L} - \vec{L}_2$ an die Stelle von $\vec{L}_1$, wählen wir die τ -Richtung, so steht $\vec{L} - \vec{L}_1$ an Stelle von $\vec{L}_2$. Bei unserem speziellen Potential ist keine der beiden Möglichkeiten ausgezeichnet.

Wir betrachten nun ein allgemeines Potential $V(\vartheta \tau u)$. Da dann zwischen μ_1 und μ_2 eine Wechselwirkung vorhanden ist, sind $\vec{L}_1$ und $\vec{L}_2$ nicht mehr scharf, und wir müssen über alle Drehimpulsquantenzahlen ℓ_1 und ℓ_2 summieren. Dasselbe gilt auch für die radialen Quantenzahlen i und k . Die allgemeine Lösung sieht daher bei ϑ -Richtung-Quantisierung wie folgt aus:

$$\Psi_m^{\ell}(\vartheta \tau u, \alpha \beta \gamma) =$$

$$\sum_{k \ell_2} \alpha_{k \ell_2} R_{k \ell_2}(\tau) \sum_{i \ell_1} b_{k \ell_2 i \ell_1} P_{i \ell_1}(\vartheta) \sum_{n=-\ell_2}^{\ell_2} C(\ell \ell_2 \ell_1, n-n_0) \sqrt{2\pi} Y_{\ell_2-n}(u, 0) \sqrt{\frac{2\ell+1}{8\pi^2}} D_{mn}^{\ell*}(\alpha \beta \gamma)$$

Weil der von u abhängige Teil der Lösung von der Summation über l_1 nicht betroffen wird, fassen wir Ψ_m^l anders zusammen. Außerdem können wir für die Summationsgrenzen von n auch l an Stelle von l_2 schreiben, wie wir uns in III überlegt haben.

$$\Psi_m^l(\vartheta, r, u, \alpha\beta\gamma) = \sum_{k, l_2} \alpha_{k, l_2} R_{k, l_2}(r) \sum_{n=-l}^l \left\{ \sum_{i, l_1} b_{k, l_2, i, l_1} P_{i, l_1}(\varrho) C(l, l_2, l_1, n-n_0) \right\} \sqrt{2\pi} Y_{l_2-n}(u, 0) \sqrt{\frac{2l+1}{8\pi^2}} D_{mn}^{l*}(\alpha\beta\gamma)$$

Die in der Klammer stehende Doppelsumme über i und l_1 können wir nun auch durch eine einfache Summe über i' ersetzen, indem wir die ϱ -Abhängigkeit nach einem neuen vollständigen Funktionensystem $P'_{i', k, l_2, n}(\varrho)$ entwickeln. Zusätzlich ordnen wir die Summen über l_2 und n um und erhalten:

$$\Psi_m^l(\vartheta, r, u, \alpha\beta\gamma) = \sum_{n=-l}^l \left\{ \sum_{i', k, l_2, n} \alpha'_{i', k, l_2, n} R_{k, l_2}(r) P'_{i', k, l_2, n}(\varrho) \sqrt{2\pi} Y_{l_2-n}(u, 0) \right\} \sqrt{\frac{2l+1}{8\pi^2}} D_{mn}^{l*}(\alpha\beta\gamma)$$

Wir haben also die Entwicklung nach Eigenzuständen von i, k, l_1, l_2 durch die Entwicklung nach i', k, l_2, n ersetzt, und es werden hier für jedes l_2 die zu diesem l_2 gehörenden l_1 -Werte exakt mitgenommen.

Im Falle der r -Richtung-Quantisierung können wir analog vorgehen und erhalten dann eine Entwicklung nach Eigenzuständen von i, k', l_1, n' , wobei n' die Projektion von $\vec{L}_1$ bzw. $\vec{L}$ auf die r -Richtung ist.

Mit diesen Überlegungen können wir jetzt in vielen Fällen entscheiden, welche Richtung für die z -Achse günstiger ist. Wir betrachten dazu die Energieeigenwerte der Funktionen, nach denen wir entwickeln, in Abhängigkeit von l_2 und n bzw. l_1 und n' . Wenn beispielsweise die Energiestufen von l_1 dichter liegen als die von l_2 , ist es vorteilhafter, nach l_2 zu entwickeln, also die ϱ -Richtung zu wählen, denn dann ist l_2 in besserer Näherung als l_1

noch eine Quantenzahl, und man kommt bei ℓ_2 mit weniger Entwicklungskoeffizienten aus. Dieses Ergebnis werden wir in Abschnitt H verwenden.

Im allgemeinen nehmen wir die Summation über n exakt mit, da sie endlich ist. Nun gibt es aber auch wichtige Fälle in der Molekülphysik und bei den Kernmodellen, bei denen n in guter Näherung eine Quantenzahl ist, da die Zustände mit verschiedenem n energetisch weit auseinander liegen. Da man dann mit einem oder nur wenigen n auskommt, ist es hier besonders vorteilhaft, die q -Richtung als ζ -Achse zu verwenden.

Die Entscheidung zwischen q - und r -Richtung läßt sich auch anschaulich verstehen. Etwas vereinfachend kann man sagen, daß in vielen Fällen dichtliegende Energiestufen klassisch großen Trägheitsmomenten und damit langsamer Rotation entsprechen. Unsere Betrachtungen besagen dann in diesem Bild, daß diejenige Richtung für die ζ -Achse günstiger ist, die langsamer rotiert.

Die bisherigen Ergebnisse gelten für 3 beliebige Massen. Wie wir in Abschnitt B überlegt haben, ist für die Praxis jedoch der Fall, daß Teilchen 1 und 2 gleich sind, besonders wichtig. In Abschnitt E III haben wir die Vertauschung dieser beiden Teilchen allgemein behandelt. Wir wenden jetzt die Resultate auf unseren Lösungsansatz an. Es ist

$$E_{\ell_2} Y_{\ell_2 n}(u, 0) = Y_{\ell_2 n}(\pi - u, 0) = (-1)^{\ell_2 + n} Y_{\ell_2 n}(u, 0)$$

Da für den symmetrischen Zustand $E_{\ell_2} \phi_{mn}^{\ell s \pm} = \pm (-1)^n \phi_{mn}^{\ell s \pm}$ und für den antisymmetrischen $E_{\ell_2} \phi_{mn}^{\ell a \pm} = \mp (-1)^n \phi_{mn}^{\ell a \pm}$ sein muß, folgt daraus, daß in einer Lösung mit gegebener Symmetrie bezüglich Teilchenvertauschung nur gerade oder nur ungerade Bahndrehimpulsquantenzahlen ℓ_2 vorkommen dürfen, und zwar enthält bei positiver Parität die symmetrische Lösung nur gerade ℓ_2 , die antisymmetrische Lösung nur ungerade ℓ_2 ; bei negativer Parität ist es genau umgekehrt. Die Teilchensymmetrie reduziert also die Entwicklungsfunktionen für einen Zustand mit bestimmter Symmetrie auf die Hälfte.

Im nächsten Abschnitt werden wir das an einem Beispiel ausführlich diskutieren.

Bevor wir uns der Lösungspraxis zuwenden, soll kurz angedeutet werden, wie unsere Lösungstheorie auf andere Probleme ausgedehnt werden kann. Einmal läßt sich damit das 4-, 5- usw. - Körper-Problem behandeln. Die Einführung der reduzierten Massen erfolgt dabei analog wie im 3-Körper-Problem, ebenso die Definition des körpergebundenen Koordinatensystems. Die 3., 4. und etwaige weitere reduzierte Massen werden einfach mit normalen Polwinkeln im körpergebundenen System beschrieben, das ja bereits durch μ_1 und μ_2 festgelegt ist. Die Lösungstheorie für die äußeren Koordinaten läuft im Prinzip genauso ab, man muß nur beachten, daß jetzt die Paritätsoperation auch auf die inneren Koordinaten wirkt. Die Lösungstheorie für die inneren Koordinaten wird umfangreicher, da die Bahndrehimpulse und die radialen Anteile der neuen reduzierten Massen hinzukommen. Die Lage des körpergebundenen Koordinatensystems hängt jedoch nicht von diesen Massen ab, so daß diese körpergebundenen Drehimpulse keine zusätzlichen Schwierigkeiten machen, sondern sich wie normale Drehimpulse verhalten. Die Probleme, die von den Bahndrehimpulsen von μ_1 und μ_2 herrühren, sind die gleichen wie beim 3-Körper-Problem und wurden in dieser Arbeit behandelt.

Eine andere besonders für kernphysikalische Probleme wichtige Erweiterung besteht darin, daß die einzelnen Teilchen einen Spin besitzen können. Es wäre nun prinzipiell möglich, auch in unsere Lösungstheorie den Spin einzubauen. Da aber dann nur der Gesamtdrehimpuls $\vec{J}$ scharf bleibt, müßten wir über ℓ summieren, d.h. unsere einzelnen Differentialgleichungssysteme würden untereinander koppeln. Bei einer konsequenten Lösungstheorie für Systeme mit Spin, wie sie H. NÄPFEL [10] entwickelt und auf das 3-Körper-Problem anwendet, wird der Spin von vornherein berücksichtigt. Für die spinfreien Anteile der Wellenfunktion kann dann auf die hier gewonnenen Ergebnisse zurückgegriffen werden.

H. LÖSUNGSPRAXIS

In diesem Abschnitt verwenden wir unsere Ergebnisse, um die gekoppelten Differentialgleichungssysteme für konkrete Potentiale numerisch zu lösen. Dazu entwickeln wir die gesuchten Wellenfunktionen nach geeignet gewählten Funktionen aus Abschnitt G und bestimmen die Entwicklungskoeffizienten sowie den Energieeigenwert, indem wir die auftretenden Matrizen diagonalisieren. Die erforderlichen Rechnungen wurden auf einer Siemens DVA 2002 durchgeführt.

Damit man an einem übersichtlichen Beispiel sieht, wie dieses Verfahren im Falle unserer gekoppelten Differentialgleichungen aussieht, beginnen wir hier genauso wie in der Lösungstheorie mit einem System, bei dem g und r starr sind.

I. g und r starr; $V = V(u)$

Wir betrachten im folgenden nur Systeme, bei denen die beiden Teilchen 1 und 2 gleich sind. Die potentielle Energie muß dann die Eigenschaft $V(u) = V(\pi - u)$ haben. Für u -unabhängiges Potential konnten wir das Problem exakt lösen. Es waren dabei $\vec{L}_1, \vec{L}_2$ und $\vec{L}$ scharf. Jetzt ist nur noch der Gesamtdrehimpuls $\vec{L}$ scharf. Da keine Funktionen von g und r vorhanden sind, erhalten wir die vollständige Entwicklung unserer Lösung, wenn wir mit unbestimmten Koeffizienten über einen der beiden Drehimpulse summieren. Die Wahl der Quantisierungsachse richtet sich hier nach dem Verhältnis der beiden Trägheitsmomente $\mu_1 g^2$ und $\mu_2 r^2$. Wir wählen $\mu_1 g^2 > \mu_2 r^2$ und entwickeln daher nach L_2 . Die Eigenzustände werden nach Gesamtdrehimpuls, Parität und Symmetrie bezüglich Teilchenvertauschung klassifiziert.

Da die Differentialgleichungen nur über die Koordinate u gekoppelt sind, zeigt unser einfaches Beispiel bereits alles Wesentliche; wir schreiben deshalb die auftretenden Funktionen ausführlich hin:

ℓ gerade:

$$\begin{aligned} \psi_m^{\ell+} &= \sum_{n=0}^{\ell} \phi_{mn}^{\ell+} \mathcal{L}_{mn}^{\ell+} \begin{cases} \psi_m^{\ell s+} = \sum_{n=0}^{\ell} \left(\sum_{\ell_2=0,2,4,\dots} c_{\ell_2 n}^{\ell s+} Y_{\ell_2 n}(u,0) \right) \mathcal{L}_{mn}^{\ell+} & \ell_2 \geq n \\ \psi_m^{\ell a+} = \sum_{n=0}^{\ell} \left(\sum_{\ell_2=1,3,5,\dots} c_{\ell_2 n}^{\ell a+} Y_{\ell_2 n}(u,0) \right) \mathcal{L}_{mn}^{\ell+} & \ell_2 \geq n \end{cases} \\ \psi_m^{\ell-} &= \sum_{n=1}^{\ell} \phi_{mn}^{\ell-} \mathcal{L}_{mn}^{\ell-} \begin{cases} \psi_m^{\ell s-} = \sum_{n=1}^{\ell} \left(\sum_{\ell_2=1,3,5,\dots} c_{\ell_2 n}^{\ell s-} Y_{\ell_2 n}(u,0) \right) \mathcal{L}_{mn}^{\ell-} & \ell_2 \geq n \\ \psi_m^{\ell a-} = \sum_{n=1}^{\ell} \left(\sum_{\ell_2=2,4,6,\dots} c_{\ell_2 n}^{\ell a-} Y_{\ell_2 n}(u,0) \right) \mathcal{L}_{mn}^{\ell-} & \ell_2 \geq n \end{cases} \end{aligned}$$

Für ℓ ungerade erhält man die gleichen Fälle, und zwar entspricht

$$(\ell \text{ ungerade}, s, +) \triangleq (\ell \text{ gerade}, a, -)$$

$$(\ell \text{ ungerade}, a, +) \triangleq (\ell \text{ gerade}, s, -)$$

$$(\ell \text{ ungerade}, s, -) \triangleq (\ell \text{ gerade}, a, +)$$

$$(\ell \text{ ungerade}, a, -) \triangleq (\ell \text{ gerade}, s, +)$$

Die zu diagonalisierenden Matrizen entstehen, indem wir die Funktionen $\phi_{mn}^{\ell \pm} = \sum_{\ell_2} c_{\ell_2 n}^{\ell \pm} Y_{\ell_2 n}(u,0)$ in die gekoppelten Differentialgleichungen von Abschnitt F einsetzen, von links mit $Y_{\ell_2' n'}(u,0)$ multiplizieren und dann mit dem Faktor $\sin u du$ integrieren, und zwar muß, wegen der Orthogonalität der Funktionen $\mathcal{L}_{mn}^{\ell \pm}(\alpha\beta\gamma)$ bezüglich n die n -te Zeile nur mit $Y_{\ell_2' n}(u,0)$, $\ell_2' \geq n$, multipliziert werden. Die Wirkung der Operatoren H_{in}^{ℓ} , B_n^{ℓ} , B_{-n}^{ℓ} auf $Y_{\ell_2 n}(u,0)$ kennen wir von Abschnitt G IV. Wir führen noch die folgenden Abkürzungen ein:

$$E_{\ell_2}^0(\ell, n) =_{\text{Def.}} \frac{\hbar^2}{2\mu_1 g_0^2} \left[\ell_2(\ell_2+1) + \ell(\ell+1) - 2n^2 \right] + \frac{\hbar^2}{2\mu_1 \tau_0^2} \ell_2(\ell_2+1)$$

$$V_{\ell_2' \ell_2}^n =_{\text{Def.}} 2\pi \int_0^{\pi} Y_{\ell_2' n}(u,0) V(u) Y_{\ell_2 n}(u,0) \sin u du$$

$$A =_{\text{Def.}} \frac{\hbar^2}{2\mu_1 g_0^2}, \quad [\ell, n] = \sqrt{(\ell+n)(\ell-n+1)}$$

und geben als Beispiel die Matrix für $\ell = 2$, s , $+$ an.

$$\underline{\ell=2, s_1+; \quad \psi_m^{\ell s+} = \left(\sum_{\ell_2=0,2,4,\dots}^{2s+} Y_{\ell_2 0}(u,0) \right) \mathcal{L}_{m0}^{2+} + \left(\sum_{\ell_2=2,4,6,\dots}^{2s+} Y_{\ell_2 1}(u,0) \right) \mathcal{L}_{m1}^{2+} + \left(\sum_{\ell_2=2,4,6,\dots}^{2s+} Y_{\ell_2 2}(u,0) \right) \mathcal{L}_{m2}^{2+}}$$

ℓ_2	$E_0^0(2,0)+V_{00}^0$	V_{02}^0	V_{04}^0	$\dots$						
0										
2	V_{20}^0	$E_2^0(2,0)+V_{22}^0$	V_{24}^0	$\dots$	$\sqrt{2} A \cdot$ [2,-0][2,-0]					
4	V_{40}^0	V_{42}^0	$E_4^0(2,0)+V_{44}^0$	$\dots$		$\sqrt{2} A \cdot$ [2,-0][4,-0]				
.	.	.	.	.						
.	.	.	.	.						
2		$\sqrt{2} A \cdot$ [2,1][2,1]			$E_2^0(2,1)+V_{22}^1$	V_{24}^1	$\dots$	$A \cdot$ [2,-1][2,-1]		
4			$\sqrt{2} A \cdot$ [2,1][4,1]		V_{42}^1	$E_4^0(2,1)+V_{44}^1$	$\dots$		$A \cdot$ [2,-1][4,-1]	
.				.	.	.	.			.
.				.	.	.	.			.
2					$A \cdot$ [2,2][2,2]			$E_2^0(2,2)+V_{22}^2$	V_{24}^2	$\dots$
4								V_{42}^2	$E_4^0(2,2)+V_{44}^2$	$\dots$
.								.	.	.
.								.	.	.

Figure 5

Die Matrizen besitzen für alle Kombinationen von $\ell(\frac{1}{2})(\pm)$ dieselbe Struktur: Um die Hauptdiagonale stehen für jedes n quadratische Untermatrizen, deren Elemente vom Potential, aber nicht von ℓ abhängen. Diese Untermatrizen sind durch "Nebendiagonalen" über $n-1$, n und $n+1$ verkoppelt. Die Quantenzahl ℓ kommt nur noch in den Nebendiagonalen und in der Hauptdiagonale vor, und zwar in ganz einfacher Weise. Darin liegt der große Vorteil dieser Entwicklung gegenüber der Entwicklung nach Eigenfunktionen von ℓ_1 und ℓ_2 , die für unser System die Form

$$\sum_{\ell_1, \ell_2} \alpha_{\ell_1, \ell_2} \left\{ \sum_n C(\ell \ell_2 \ell_1, n-n_0) Y_{\ell_2-n}(u, 0) D_{mn}^{\ell*}(\alpha \beta \gamma) \right\}$$

hat und die als Matricelemente

$$V_{\ell_1 \ell_2' \ell_1 \ell_2} = \sum_n C(\ell \ell_2' \ell_1', n-n_0) C(\ell \ell_2 \ell_1, n-n_0) V_{\ell_2' \ell_2}^n$$

liefert, also Matricelemente, die nicht nur komplizierter, sondern auch für jedes ℓ verschieden sind. Für Diagonalisierungsverfahren ist daher immer unsere Methode besser; die zweite Möglichkeit ist dagegen für eine erste Näherung geeignet, weil man hier für das ungestörte Problem eine Diagonalmatrix erhält.

An unseren Matrizen erkennen wir wieder unmittelbar die Bedeutung der g - bzw. r -Richtung-Quantisierung. Im einen Fall enthalten die Nebendiagonalen den Faktor $\frac{\hbar^2}{2\mu_1 g^2}$, im anderen $\frac{\hbar^2}{2\mu_2 r^2}$. Es hängt somit direkt von der Größe der Trägheitsmomente ab, wie stark die Zustände mit verschiedenem n bzw. n' untereinander über die Nebendiagonalen verkoppelt sind.

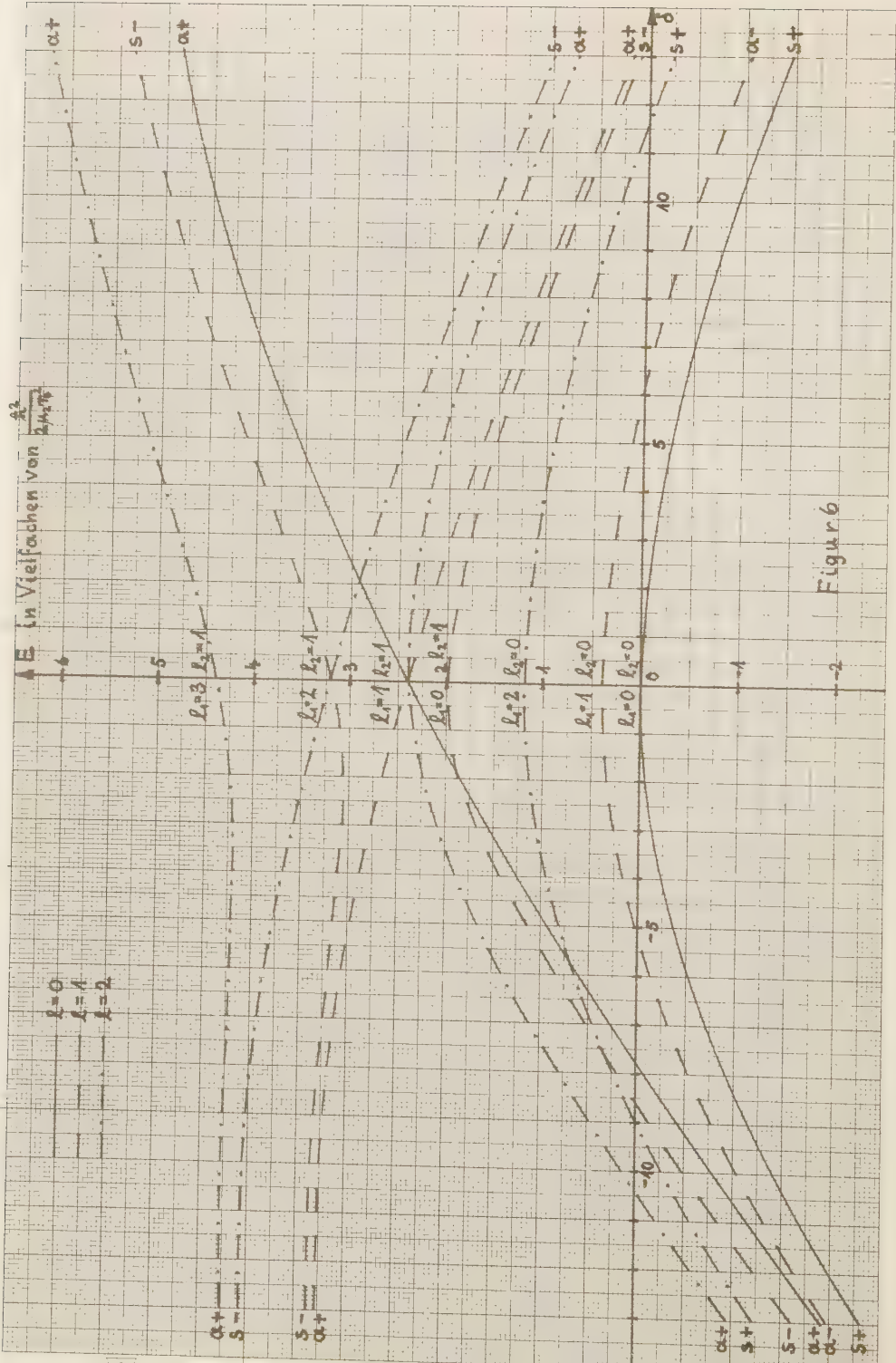
Bevor wir uns den numerischen Ergebnissen zuwenden, noch eine Bemerkung zum Rechenprogramm: Da wir die ungefähre Lage der Eigenwerte vom ungestörten Problem her kennen und in vielen Fällen von einer Matrix nur die tiefsten Eigenwerte brauchen, bestimmen wir diese, indem wir die Nullstellen der Determinante durch Interpolation ermitteln. Diese Methode hat sich bei den von uns betrachteten Problemen als numerisch sehr stabil erwiesen. Die Eigenwerte haben eine relative Genauigkeit von ungefähr 10^{-9} , wenn die Maschine mit zehnstelligen Gleitkommazahlen rechnet.

Für unser spezielles Beispiel haben wir für die potentielle Energie $V(u) = \delta(\cos^2 u - 1/3) = \delta \frac{4}{3} \sqrt{\frac{7}{5}} Y_{20}(u, 0)$ und für $\frac{\mu_1 g_0^2}{\mu_2 r_0^2} = 5$ gewählt. Die Niveaus sind in Figur 6 als Funktion von δ aufgetragen. Für $\delta = 0$ ist $E = \frac{\hbar^2 l_1(l_1+1)}{2\mu_1 g_0^2} + \frac{\hbar^2 l_2(l_2+1)}{2\mu_2 r_0^2}$ und wir haben Entartung, da zu gegebenen l_1 und l_2 alle Gesamtdrehimpulse mit $|l_1 - l_2| \leq l \leq l_1 + l_2$ gehören. Diese Entartung wird für $\delta \neq 0$ aufgehoben. Für große δ oder kleine $\frac{\hbar^2}{2\mu_1 g_0^2}$, das heißt, wenn die Matricelemente $V_{l_2 l_1}^n$ größer werden als die in den Nebendiagonalen, erhalten wir näherungsweise die Niveaus, die durch Diagonalisierung der n -Untermatrizen für sich allein entstehen würden. Diese Niveaus unterscheiden sich für gleiches n aber verschiedenes l wegen der Form von $E_{l_2}^0(l, n)$ nur durch $\frac{\hbar^2}{2\mu_1 g_0^2} l(l+1)$ und sind damit normale Rotationsbanden.

Unser Beispiel zeigt also den Übergang von der völlig entkoppelten Bewegung, die durch l_1 und l_2 beschrieben wird, bis zur stark gekoppelten, die durch l , n und den Zustand von $\mu_2 r_0^2$ charakterisiert ist und bei welcher μ_2 der "langsamen Rotation" von μ_1 wegen des u -abhängigen Potentials adiabatisch folgt.

II. $\mathfrak{g}$ starr, $V = V(ru)$

Dieser Fall entspricht den Modellen für u - g -Kerne: Der aus den Massen m_1 und m_2 gebildete Rumpf besitzt um die Verbindungslinie $\mathfrak{g}$ kein Trägheitsmoment, und damit ist auch der Drehimpuls des Rumpfes um diese Achse immer Null, wie es experimentell beobachtet wird. Da in der Nebendiagonale bei $\mathfrak{g}$ -Richtung-Quantisierung kein r vorkommt, ändert sich die Struktur der Matrizen nicht. Lediglich die Elemente der Untermatrizen werden jetzt ebenfalls Matrizen, deren Länge durch die Anzahl der Entwicklungsfunktionen für die r -Abhängigkeit gegeben ist, und die Nebendiagonalen werden entsprechend länger. Es treffen daher alle unter I angestellten Überlegungen auch hier zu. Ein quantitativer Vergleich mit den vorhandenen Modellen ist nur möglich, wenn man den Spin von Teilchen 3 mitnimmt. Dies geschieht unter Verwendung der hier gewonnenen Erfahrungen bei H. NÄPFEL [10].



III. $V = V(\mathbf{g}r\mathbf{u})$

Wenn man die potentielle Energie $V(\mathbf{g}r\mathbf{u})$ so wählt, daß sie für $\mathbf{g} = \mathbf{g}_0$ in $V(r\mathbf{u})$ aus II übergeht und zusätzlich ein $V(\mathbf{g}-\mathbf{g}_0)$ einführt, erhält man eine Erweiterung des Kernmodells, bei dem die beiden Massen m_1 und m_2 , die zusammen den Rumpf bilden, gegeneinander schwingen können. Die Kopplung zwischen der Schwingung und der Rotation erfolgt über das veränderliche Trägheitsmoment, die zwischen der Schwingung und der Bewegung von m_3 über das Potential. Die zu diagonalisierenden Matrizen werden entsprechend größer, und aus den Elementen der Nebendiagonalen entstehen Untermatrizen. Da auch für dieses Modell der Spin von Teilchen 3 wesentlich ist, verfolgen wir es hier nicht weiter, sondern wenden uns den 3-Teilchen-Systemen mit Coulomb-Wechselwirkung zu, bei denen wir den Spin in guter Näherung vernachlässigen können. Er bewirkt dann nur, daß symmetrische und antisymmetrische Ortsfunktionen bezüglich Teilchenvertauschung auftreten. Im Prinzip ist es nun möglich, alle Eigenzustände zu berechnen, indem wir die u -Abhängigkeit wie oben nach $Y_{l_2 n}(u, 0)$ und die $\mathbf{g}$ - und r -Abhängigkeit nach geeigneten Polynomen entwickeln und damit die nach Gesamtdrehimpuls und Parität getrennten Differentialgleichungssysteme lösen. Die für die Matricelemente benötigten Integrale lassen sich geschlossen auswerten, wenn man die in der potentiellen Energie vorkommenden Abstände zwischen Teilchen 1 und 3 sowie Teilchen 2 und 3 folgendermaßen entwickelt (Teilchen 1 und 2 sollen wieder gleich sein) :

$$\frac{1}{\sqrt{(\frac{r}{2})^2 + r^2 + \mathbf{g}r\cos u}} + \frac{1}{\sqrt{(\frac{r}{2})^2 + r^2 - \mathbf{g}r\cos u}} = \begin{cases} \frac{4}{g} \sum_{v=0}^{\infty} \left(\frac{2r}{g}\right)^{2v} P_{2v}(\cos u) & r \leq \frac{g}{2} \\ \frac{2}{r} \sum_{v=0}^{\infty} \left(\frac{g}{2r}\right)^{2v} P_{2v}(\cos u) & \frac{g}{2} \leq r \end{cases}$$

während jedoch die Entwicklung der Eigenfunktionen nach $Y_{l_2 n}(u, 0)$ bei unserem Beispiel in I und bei den Kernmodellen gut konvergiert, ist dies bei der Coulomb-Wechselwirkung nicht mehr der Fall. Das hat folgenden physikalischen Grund: Bei den zuerst

genannten Problemen ist die potentielle Energie eine relativ glatte Funktion von u . Bei der Coulomb-Wechselwirkung dagegen enthält sie für $r = \frac{g}{2}$ an den Stellen $u = 0$ und $u = \pi$ Singularitäten. Wenn jetzt zwischen Teilchen 1 und 3 sowie Teilchen 2 und 3 Anziehung herrscht, ist die Wellenfunktion genau in diesem Bereich besonders groß und besitzt dort eine Spitze. Um nun diese Spitze in der u -Abhängigkeit mit $Y_{l,2n}(u,0)$ gut anzunähern, müssen wir sehr viele Funktionen mitnehmen. Da wir das Verhalten der exakten Lösung an den singulären Punkten kennen, gibt uns diese Überlegung gleichzeitig einen Hinweis, wie wir eine bessere Konvergenz erzielen können. Wir ziehen dazu eine geeignet gewählte Funktion als Faktor heraus und entwickeln den "glatteren" Rest. Dabei geht zwar die Orthogonalität unserer Entwicklungsfunktionen verloren, aber das ist für das Diagonalisierungsverfahren belanglos.

Mit dieser Methode behandeln wir jetzt das Heliumatom. Die Ordnungszahl Z lassen wir dabei zunächst allgemein stehen. Es ist dann $m_1 = m_2 = m_e$, $m_3 = m_{He}$, $\mu_1 = \frac{m_e}{2}$, $\mu_2 = \frac{2m_e}{1 + \frac{2m_e}{m_{He}}}$; Weiter führen wir dimensionslose Größen ein:

$$s' = \frac{1}{2} \frac{Ze^2 2m_e}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} s, \quad r' = \frac{Ze^2 2m_e}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} r, \quad \lambda = \frac{(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2}{Z^2 e^4 m_e} E$$

Für $l = 0$ erhalten wir die folgende Eigenwertgleichung:

$$\left\{ \left[\frac{\partial^2}{\partial s'^2} + \frac{2}{s'} \frac{\partial}{\partial s'} + \frac{1}{s'^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial u^2} + \cot u \frac{\partial}{\partial u} \right) \right] + \left(1 + \frac{2m_e}{m_{He}} \right) \left[\frac{\partial^2}{\partial r'^2} + \frac{2}{r'} \frac{\partial}{\partial r'} + \frac{1}{r'^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial u^2} + \cot u \frac{\partial}{\partial u} \right) \right] + 2 \left[\frac{1}{\sqrt{s'^2 + r'^2 - 2s'r'\cos u}} + \frac{1}{\sqrt{s'^2 + r'^2 + 2s'r'\cos u}} - \frac{1}{2Zs'} \right] + \lambda \right\} \Psi = 0$$

Den He-Kern nehmen wir jetzt unendlich schwer an, bemerken aber, daß dabei der Charakter als 3-Körper-Problem keineswegs verloren geht und daß auch eine endliche Masse m_3 in unseren Koordinaten relativ einfach mitzunehmen wäre. Für die Wellenfunktion machen wir auf Grund unserer obigen Überlegungen den Ansatz:

$$\Psi = \psi_0(s'r'u) f(s'r'u) \quad \text{mit} \quad \psi_0 = e^{-\frac{1}{2}\sqrt{s'^2 + r'^2 - 2s'r'\cos u} - \frac{1}{2}\sqrt{s'^2 + r'^2 + 2s'r'\cos u} + \frac{1}{2Z}s'}$$

der, in die Eigenwertgleichung eingesetzt, liefert:

$$\begin{aligned} & \Psi_0 \left[\frac{\partial^2}{\partial s^2} + \frac{2}{s} \frac{\partial}{\partial s} + \frac{1}{s^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial u^2} + \cot u \frac{\partial}{\partial u} \right) + \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} + \cot \alpha \frac{\partial}{\partial \alpha} \right) + \left(1 - \frac{1}{(2Z)^2} + \lambda \right) \right] \Psi + \\ & + 2 \left[\frac{\partial \Psi}{\partial s} \left(\frac{1}{2Z} + \frac{\partial}{\partial s} \right) + \frac{\partial \Psi}{\partial r} \frac{\partial}{\partial r} + \left(\frac{1}{s^2} + \frac{1}{r^2} \right) \frac{\partial \Psi}{\partial u} \frac{\partial}{\partial \alpha} \right] \Psi = 0 \end{aligned}$$

Da $\Psi_0(s'r'u) = \Psi_0(s'r'\pi-u)$ ist, also symmetrisch bezüglich Teilchenvertauschung, hat Ψ die gleiche Symmetrie wie f . Für den symmetrischen Grundzustand sieht daher die Entwicklung von f folgendermaßen aus:

$$f(s'r'u) = \{ g_0(s'r') Y_{00}(u,0) + g_2(s'r') Y_{20}(u,0) + \dots \}$$

Wir haben drei Näherungen gerechnet, an denen man bereits die sehr gute Konvergenz des Verfahrens erkennt.

$$f = 1 \quad E = -2,85550 \quad \text{atomare Einheiten}$$

$$f = 1 + c_1 s' \quad E = -2,87919 \quad \text{a.E.}$$

$$f = 1 + c_1 s' + c_2 r'^2 \quad E = -2,90001 \quad \text{a.E.}$$

Mit Hilfe von Variationsverfahren, bei denen bis zu 1078 Parameter mitgenommen wurden, ergibt sich der Wert $E = -2,903724376 \text{ a.E.}$ Unser Ergebnis, das nur 2 Parameter, c_1 und c_2 , enthält, ist also auf ca. 1‰ genau.

Wir haben damit auch für Systeme mit Coulomb-Wechselwirkung eine Methode gefunden, die mit übersichtlichen Entwicklungsfunktionen sehr rasch konvergiert und alle Vorteile unserer Koordinaten besitzt, wobei besonders die Teilchenvertauschung bei beliebigen Drehimpulsen zu betonen ist.

In der Entwicklung von f für den tiefsten antisymmetrischen Zustand kommen nur $Y_{20}(u,0)$ mit $\ell = 1, 3, 5, \dots$ vor. Als nullte Näherung verwenden wir $f = s'r' Y_{10}(u,0)$. Dieser Ansatz folgt zwangsläufig aus den Symmetrieforderungen für diesen Zustand. Er liefert den Eigenwert $E = -1,94 \text{ a.E.}$, der mit dem

richtigen Wert -2,17 a.E. zu vergleichen ist; eine für einen parameterfreien Ansatz recht gute Übereinstimmung.

Wir stellen noch für $Z \geq 2$ unseren Ansatz nullter Näherung für den Grundzustand ($l = 1$) dem für Systeme dieser Art üblichen einparametrischen Variationsansatz $e^{-k(\sqrt{g'^2+r'^2}-2g'r'\cos u + \sqrt{g'^2+r'^2}+2g'r'\cos u)}$ gegenüber (E wieder in atomaren Einheiten):

Z	Variation	$l = 1$	Experiment
2	- 2,848	- 2,856	- 2,904
3	- 7,223	- 7,235	- 7,280
4	-13,598	-13,612	-13,656
5	-21,973	-21,988	-22,032

Unser vor die Lösungsentwicklung gezogener Faktor $\psi_0(g'r'u)$ eignet sich also für jedes $Z \geq 2$ und ergibt stets einen besseren Wert als der einparametrische Variationsansatz, wobei die Güte mit wachsendem Z noch zunimmt.

Herr Professor Dr. H.Volz widmete dieser Arbeit viel Zeit und Interesse und gab mir in zahlreichen Diskussionen viele wertvolle Anregungen. Ich möchte mich dafür herzlich bedanken.

Der freundschaftliche Gedankenaustausch mit Herrn H.Näpfel hat zur Klärung mancher Probleme beigetragen.

Der Firma Siemens A.G. danke ich für die großzügig zur Verfügung gestellte Rechenzeit.

L i t e r a t u r

- 1 WEIGERT, L., Dissertation, Erlangen 1959
- 2 DIEHL, H., FLÜGGE, S., SCHRÖDER, U., VÖLKE, A., WEIGUNY, A.,
Z.Physik 162, 1-14 (1961)
- 3 VO-THE-HAO, Dissertation, Louvain 1960
- 4 NÄPFEL, H. und RUDER, H., Diplomarbeiten Erlangen 1964
- 5 ZICKENDRAHT, W., Proc.Natl.Acad.Sci.U.S. 52 1565 (1964)
- 6 ZICKENDRAHT, W., Ann.of Phys. 35 18-41 (1965)
- 7 SCHRÖDINGER, E., Ann.d.Phys. 79, 361-376 (1926)
- 8 HYLLERAAS, E. A., Z.Physik 48, 469-494 (1928)
- 9 ROSE, M. E., Elementary Theory of Angular Momentum,
Wiley, New York 1966
- 10 NÄPFEL, H., Dissertation, Erlangen 1967

LEBENS LAUF

Am 3.11.1939 wurde ich, Hanns Rudolf Ruder, als Sohn des Fabrikanten Hans Ruder und seiner Ehefrau Else, geb. Herrmann, in Nürnberg geboren. Von 1946 bis 1949 besuchte ich die Volksschule, von 1949 bis 1958 die Dürer-Oberrealschule in Nürnberg, an der ich am 17.7.1958 die Reifeprüfung ablegte. Im Wintersemester 1958 begann ich, in Erlangen Physik zu studieren. Am 2.11.1961 bestand ich das Vordiplom. Hierauf bewarb ich mich im Institut für Theoretische Physik um eine Diplomarbeit. Vom 1.5.1963 bis 30.4.1964 bekleidete ich eine studentische Hilfskraftstelle. Am 6.5.1964 legte ich die Diplomprüfung ab. Vom 1.5.1964 bis 15.9.1964 erhielt ich ein Volkswagenwerk-Promotionsstipendium. Am 24.7.1964 heiratete ich die Mathematikerin Margret Haunroth. Seit dem 16.9.1964 bin ich Verwalter einer wissenschaftlichen Assistentenstelle im Institut für Theoretische Physik bei Herrn Professor Dr. H. Volz.

